



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**“Transporte de carga en
grafeno bajo
radiación electromagnética”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

FRANCISCO JAVIER LÓPEZ RODRÍGUEZ

DIRECTOR DE TESIS: DR. GERARDO GARCÍA NAUMIS

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. CHUMIN WANG CHEN

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. MANUEL TORRES LABANSAT



posgrado en ciencias físicas
u n a m

MÉXICO, D.F.

AGOSTO, 2010.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

TRANSPORTE DE CARGA EN GRAFENO BAJO
RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA.

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA) PRESENTA
EL MAESTRO EN CIENCIAS
FRANCISCO JAVIER LÓPEZ RODRÍGUEZ.

TUTOR PRINCIPAL
DR. GERARDO GARCÍA NAUMIS.

COMITÉ TUTORAL
DR. CHUMIN WANG CHEN
DR. MANUEL TORRES LABANSAT

27 de agosto de 2010

Índice general

Resumen	v
Abstract	vii
1. Introducción	1
1.1. Estructura electrónica del grafeno.	6
1.2. Efecto Hall	11
1.3. Paradoja de Klein	14
1.4. Conductividad mínima	17
1.5. Propiedades ópticas del grafeno.	21
2. Portadores de carga en sólidos bajo campos electromagnéticos	23
2.1. Electrones en una red periódica con campo eléctrico constante	24
2.2. Electrones sometidos a campos magnéticos constantes	29
2.2.1. Electrones en una red periódica con campo magnético constante	32
2.3. La cadena de Fibonacci	36
2.4. Electrones sometidos a campos magnéticos constantes y radiación.	40
3. Grafeno sometido a radiación	45
3.1. Planteamiento del problema y modelo.	45
3.2. Método de solución usando una transformación unitaria	50
3.3. Método de solución usando una función de prueba.	54
3.3.1. Electrones libres.	55
3.3.2. Campos eléctricos intensos	56
3.3.3. Campos eléctricos débiles.	62
4. Corriente electrónica en grafeno.	67
4.1. Función de onda	67
4.2. Cálculo de corriente.	74
5. Conclusiones y perspectivas.	81
A. Ecuación de Dirac	83

B. Relaciones de conmutación	87
C. Base de pseudohelicidad	89
D. Teoría de Floquet	91
E. Programa	95
F. Artículos.	97
F.1. Artículos publicados.	97
F.2. Relación de citas a los artículos publicados.	97

Resumen

En este trabajo, presentamos un estudio del problema de cargas en grafeno sometidas a radiación electromagnética. En específico, se analizan dos variaciones del problema, en la primera la radiación incide de manera perpendicular a la muestra de grafeno y en la segunda, la onda de radiación viaja en el plano del grafeno, es decir, es paralela a la dirección en que se mueven las cargas en la muestra.

En el primer caso, se analizó el espectro y las funciones de onda como solución de una ecuación tipo Mathieu, en los límites de campos eléctricos débiles y fuertes. En ambos límites se encontró que el espectro está compuesto por bandas permitidas y prohibidas. De hecho, en el caso particular del límite de campos eléctricos débiles se obtuvo que el espectro tiene una banda prohibida de energía cerca de la energía de Fermi. Esta banda prohibida tiene una dependencia funcional lineal con la intensidad de la onda de radiación.

En la segunda situación planteada, se encontró una ecuación diferencial aproximada que nos proporcionó el espectro de energías y una solución analítica. Con las funciones de onda obtenidas, se calculó la corriente eléctrica. Así se obtuvo el siguiente resultado: al aplicar una onda electromagnética de una frecuencia determinada, el grafeno genera una corriente que se compone de armónicos con frecuencias que son múltiplos de la frecuencia original. Es decir, la corriente muestra un comportamiento fuertemente no lineal. Este resultado tiene una gran importancia en aplicaciones tecnológicas pues podría ser el precursor de comunicaciones más rápidas.

Abstract

In this work, we present a research of the behavior of charge carriers in graphene under electromagnetic radiation. In specific, we analyze two situations of the problem, in the first one, we consider that the radiation is perpendicular to the sample of graphene and in the second one, we consider that the electromagnetic wave travels parallel to the sample.

In the first case, we analyze the spectrum and the wave functions as a solution to a Mathieu equation in the limits of intense and weak electric fields. In both limits, the spectrum is composed of bands and gaps. In fact, in the particular case of weak electric field limit, we find that the spectrum presents a gap near the Fermi energy. This gap is linear on the electromagnetic wave intensity.

In the second situation, we find an approximate differential equation which gives us the spectrum and an analytic solution for the wave function. With the obtained solution, we calculate the electric current. The result shows that when graphene is under an electric signal of determinate frequency, it produces harmonics whose frequencies are multiples of the original frequency, i.e., the current shows a strongly nonlinear behaviour. This last result has a great importance in technological development, because it will be the precursor of faster communications.

Capítulo 1

Introducción

Debido a la variedad de estructuras formadas por el carbono, este elemento tiene una gran importancia tanto en investigación básica como en aplicaciones tecnológicas. El carbono puede presentar diversas formas alotrópicas, dos de las cuales son el grafito y el diamante. Para poder explicar dichas formas, es necesario introducir funciones de onda híbridas, conocidas como orbitales moleculares. En primer lugar mencionemos las funciones de onda híbridas sp^3 que se obtienen a partir de combinaciones lineales de las funciones s , p_x , p_y y p_z . En conjunto, estas funciones híbridas son 4 y tienen máximos que apuntan hacia los vértices de un tetraedro (Fig.(1.1)). Con tal estructura es posible comprender la forma del diamante.

Para comprender la estructura del grafito (por cierto, el elemento usado para fabricar el lápiz común) es necesario considerar las funciones de onda híbridas sp^2 que se forman con combinaciones lineales de funciones de onda s , p_x y p_y (Fig.1.2). Estas combinaciones producen tres funciones de onda en el plano x, y con máximos en direcciones que forman ángulos de 120° . Con tales características, estas funciones de onda híbridas dan lugar a la estructura hexagonal de los átomos de cada una de las capas de las que se forma el grafito.

Hace apenas unos 10 años se encontraron un par de formas alotrópicas más del carbono, los fullerenos que tienen dimensión cero [1], [2], [3] y los nanotubos de carbono que son entes unidimensionales [4], [5]. Ambas formas alotrópicas han sido extensivamente estudiadas debido a sus interesantes propiedades mecánicas, ópticas y eléctricas. Estas propiedades podrían ser precursoras de una gran variedad de usos tecnológicos. El avance en el proceso de síntesis de estas formas alotrópicas le ha dado también un gran impulso al estudio del carbono. Faltaba, sin embargo, un compuesto bidimensional de carbono, el grafeno.

Aislar grafeno fue un proceso muy complicado. Los primeros intentos para aislarlo se concentraron en usar la técnica conocida como exfoliación química. Con este propósito, el grafito en bulto era crecido de tal manera que los planos de grafeno eran separados por capas de otros átomos ó moléculas [6]. Esto resultaba generalmente en nuevos materiales tridimensionales. Sin embargo, en ciertos casos podían insertarse moléculas de gran tamaño entre los planos atómicos logrando que los componentes resultantes pudieran ser considerados como capas de grafeno aisladas en una matriz tridimensional.

Otros intentos se basaron en crecimiento epitaxial por una técnica conocida como deposición química de vapor (CVD por sus siglas en inglés) de hidrocarburos en substratos de metal. Con tales intentos se lograba obtener muestras de grafeno de algunas capas de espesor [7]. El aislamiento de este material fue logrado finalmente por un grupo en Manchester Inglaterra liderado por A. K. Geim en 2004 [8], [9]. Para obtenerlo se utilizó un procedimiento muy sencillo conocido como separación micromecánica.

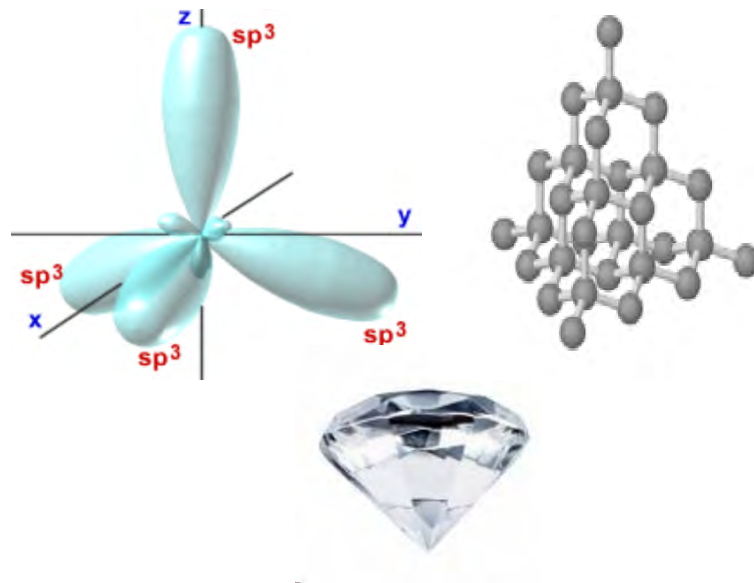


Figura 1.1: Función híbrida sp^3 , correspondiente a la estructura del diamante.

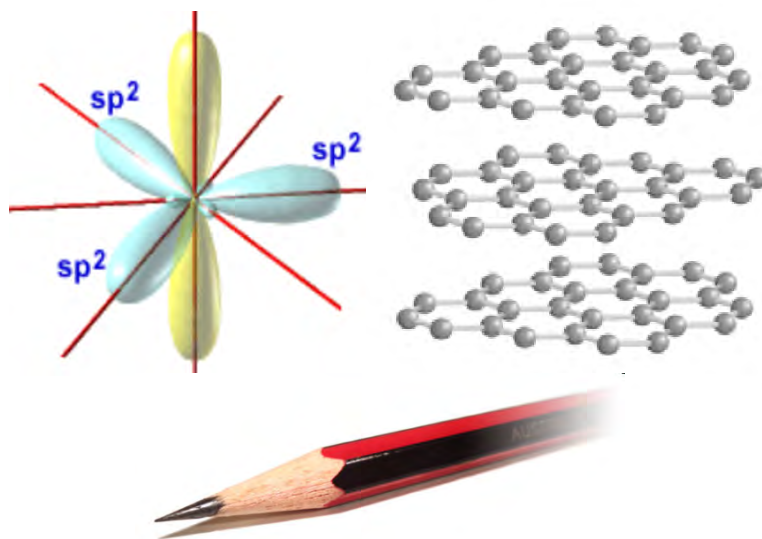


Figura 1.2: Función híbrida sp^2 , correspondiente a la estructura del grafito.

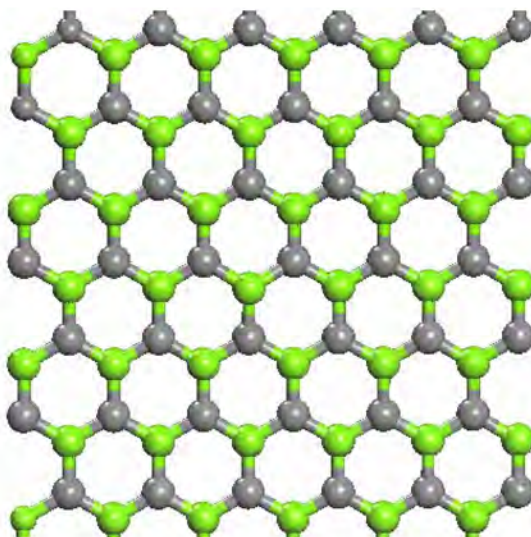


Figura 1.3: Nanoalambre cuya frontera es tipo silla en la dirección vertical.

El procedimiento consiste en tomar una muestra de grafito con cinta adhesiva. Esta cinta adhesiva con muestra se pega y despega en dióxido de silicio SiO_2 , hasta lograr capas más delgadas. Entre los residuos que quedan, se encuentran siempre capas de un solo átomo de átomos de carbono, lo cual se corrobora usando microscopios ópticos y generalmente también con microscopios de fuerza atómica.

Como es de esperarse, las monocapas de átomos de carbono son las menos, así que es importante desarrollar otras técnicas para la caracterización de estas. Entre este tipo de técnicas podemos mencionar la espectroscopia Raman, técnica basada en la excitación de fonones de la red usando rayos láser de diferentes longitudes de onda. Con esta técnica es posible distinguir entre grafeno de una sola capa y grafeno de algunas capas [10].

Recientemente se ha encontrado un nuevo método para producir muestras de este alótropo que consiste en cortar y extender nanotubos de carbono. La técnica se basa en atacar químicamente los nanotubos con ácido sulfúrico y permanganato de potasio como agente oxidante [11], [12].

Es importante mencionar que experimentalmente se obtienen muestras grafeno conocidas como nanoalambres [13]. Existen dos tipos de nanoalambres que toman sus nombres del como están conectados los átomos de la frontera, así pues tenemos los nanoalambres con frontera tipo silla Fig.(1.3) y los nanoalambres con frontera tipo zigzag Fig. (1.4).

El grafeno es el primer ejemplo de un material verdaderamente bidimensional, que según estudios realizados por Landau y Peierls no debería existir debido a su inestabilidad termodinámica [14]. Hace más de 70 años estos investigadores señalaron que contribuciones divergentes de fluctuaciones térmicas en redes cristalinas de baja dimensión producirían desplazamientos de los átomos de la red que serían comparables a distancias interatómicas, todo esto a una temperatura finita. El argumento fue después extendido por Mermin [15], y había sido comprobado por una gran cantidad de observaciones experimentales. De hecho, el punto de licuefacción de películas delgadas decrece con el espesor provocando que las películas sean inestables.

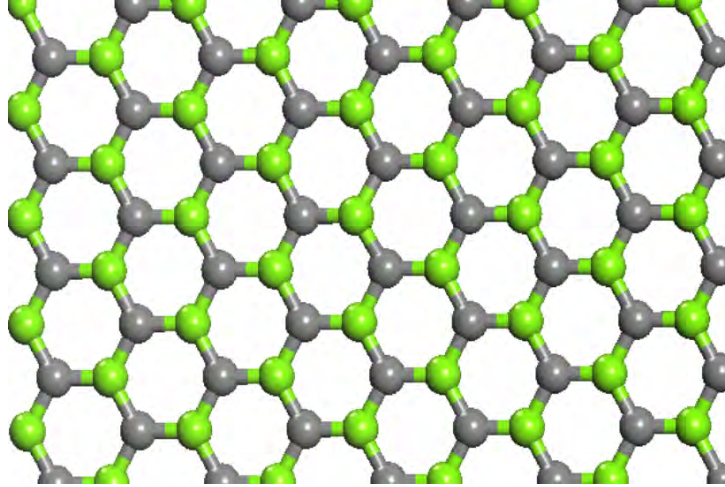


Figura 1.4: Nanoalambre con frontera tipo zig-zag en la dirección vertical. El nombre proviene de como están conectados los átomos de la frontera.

Con el descubrimiento experimental del grafeno y otros cristales bidimensionales, como el nitruro de boro de una sola capa de átomos, los conocimientos anteriores fueron retados. Además no sólo se encontró que estos cristales eran estables sino también que sus propiedades electrónicas son interesantes como, por ejemplo, su alta movilidad. De hecho con este material se puede medir efectos cuánticos como el efecto Hall muy fácilmente [16]. Pero, ¿como es que la estabilidad de estos cristales puede ser reconciliada con la teoría? Esto se puede entender diciendo que los cristales bidimensionales obtenidos están en un estado metaestable por haber sido extraídos de un material tridimensional, aparte de esto su pequeño tamaño ($\ll 1$ mm) y sus fuertes enlaces interatómicos aseguran que las fluctuaciones térmicas no produzcan dislocaciones u otros defectos cristalinos, incluso a altas temperaturas. Un punto de vista complementario es que el cristal bidimensional es estable debido a que presenta un arrugamiento suficiente en la tercera dimensión [17]. Tal arrugamiento produce una ganancia en la energía elástica suprimiendo vibraciones térmicas grandes. Esta hipótesis, sin embargo, no puede ser considerada del todo correcta puesto que recientemente se ha obtenido grafeno ultraplano con rugosidades que presentan alturas promedio menores a los 0.25Å [18].

En lo que respecta a su estructura electrónica, esta ya se había obtenido antes de su descubrimiento como parte de un estudio sobre las propiedades electrónicas del grafito [19]. Como veremos en la sección 1.1. Estructura electrónica del grafeno, la estructura electrónica de este material muestra que este alótropo del carbono puede ser considerado como un semimetal o como un semiconductor con una banda prohibida de energía de tamaño cero. En este mismo sentido es importante mencionar que los nanoalambres de grafeno tienen una estructura electrónica que depende de si tienen frontera tipo silla o tipo zigzag. Los nanoalambres con frontera tipo silla son siempre semiconductores [20], en contraste los nanoalambres

con frontera tipo zigzag pueden ser metálicos o semiconductores dependiendo del ancho en constantes de red del nanoalambre [20].

El grafeno, además de ser el punto de inicio para todos los cálculos relacionados con el grafito, también lo es para los estudios relacionados con nanotubos de carbono y fullerenos. Los nanotubos de carbono y los fullerenos son de hecho, placas de grafeno enrolladas.

Estudios experimentales posteriores a su descubrimiento mostraron que las cargas de este material se comportan como fermiones de masa cero [21], que usualmente se describen mediante la ecuación de Dirac (ver apéndice A). En este apartado acerca de la descripción de partículas en grafeno, debemos mencionar que existen otras formas de estudiar cargas este alótropo del carbono como, por ejemplo, usando una ecuación de Schrödinger con un potencial $U(\vec{r})$ que describa la red hexagonal del grafeno. Sin embargo, en este trabajo nos apearemos al estudio como se hace de manera más natural, es decir, con la ecuación de Dirac. Haciéndolo de este modo, se puede mostrar que las cargas tienen una serie de peculiaridades muy interesantes como la asociación de un pseudospin y de una quiralidad [22], cosas que serán discutidas posteriormente con mayor amplitud en este capítulo. A este respecto, tenemos que el grafeno provee un puente muy interesante entre la física de estado sólido y la electrodinámica cuántica. Con él se podrían probar fenómenos de electrodinámica cuántica como la paradoja de Klein, el Zitterbewegung [23] y el mecanismo de Schwinger [24], este último fenómeno se refiere a la producción partícula-antipartícula generados del vacío por un campo eléctrico realmente muy intenso. Para el caso de grafeno se hizo la propuesta experimental en el 2008 [25], con la diferencia de que obtendríamos pares electron-hueco. Además, como también describiremos en la sección 1.2., se ha encontrado un efecto Hall anómalo, donde la secuencia de la conductividad se modifica con respecto a la secuencia estandar del efecto Hall cuántico por un factor de $1/2$. Otro aspecto teórico interesante es que con grafeno se ha comenzado a usar de manera natural el formalismo de la teoría cuántica de campos en espacios curvos [26], esto como una manera de estudiar las posibles consecuencias de los arrugamientos sobre sus propiedades electrónicas.

En lo que respecta a aplicaciones, podemos mencionar que se piensa en un futuro muy prometedor para este material, pues tiene movilidades tan altas como $15\,000\text{ cm}^2V^{-1}s^{-1}$ que dependen débilmente de la temperatura y se han obtenido movilidades de $200\,000\text{ cm}^2V^{-1}s^{-1}$ al hacer las mediciones con grafeno suspendido [28], estas movilidades son 2 ordenes de magnitud mayores que las de silicio, que para el caso de electrones tiene una movilidad de $1\,400\text{ cm}^2V^{-1}s^{-1}$. Lo anterior podría traducirse en alcanzar la meta de tener un material con transporte balístico a escala micrométrica con una temperatura de 300 K. Estas movilidades tan altas son el resultado de que en los enlaces en grafeno tres de los electrones de cada átomo de carbono están muy atados a los átomos vecinos sin embargo, el electrón restante que se encuentra en un orbital tipo p no participa en los enlaces quedando bastante libre como para moverse más fácilmente a través del cristal.

Considerando estas propiedades, se ha pensado en hacer transistores de efecto de campo, sin embargo, existe una dificultad fundamental y es que debido a la paradoja de Klein, los electrones no se pueden confinar por una barrera de potencial (los electrones tienen un tunelaje perfecto cuando un haz de estos impacta normamente una barrera de potencial). Existe, sin embargo, la posibilidad de usar nanoalambres para crear este tipo de dispositivos sobre todo considerando que estos pueden ser semiconductores o metales. Con los nanoalambres de tipo semiconductor ya se ha podido construir transistores de efecto de campo tipo n [29], [30] y tipo p [31]. Por otra parte, unos meses antes a la creación de estos transistores, en el mismo lugar donde se había aislado el grafeno por primera vez, se logró producir un transistor de un solo electrón [32], a través del uso de puntos cuánticos.

Otra prometedora dirección para la aplicación del grafeno es como válvula de espín [33]. El grafeno ha sido propuesto como un material ideal para la conducción del espín [34], [35]. Esto se debe principalmente a que el acomplamiento espín orbita en grafeno es despreciable [33] y también a que el transporte

espintrónico es del orden de micrómetros [35] al igual que el transporte electrónico, es decir, el camino libre medio de partículas cargadas en grafeno es grande. El grupo de Karpan [36], ha mostrado teóricamente que el grafeno podría permitir el paso de espín apuntando en una dirección y no en la otra. La utilidad práctica de este hecho es que la transmisión a través de interfases entre metales normales y ferromagnéticos depende del espín que se tenga, lo cual a su vez tiene mucha importancia en la observación de magnetoresistencias gigantes.

En las aplicaciones que hemos mencionado es necesario hacer mucha más investigación. Existe, sin embargo, una área donde el grafeno está siendo ya aplicado y esta es como sensor de gas. Un grupo experimental en Manchester [37], ha mostrado que el grafeno puede absorber moléculas de gas de la atmósfera que lo rodea, resultando en grafeno dopado con electrones o huecos dependiendo del gas absorbido.

En lo relativo a sus propiedades mecánicas podemos decir que este material es el más fuerte que se conoce, posee una dureza mucho mayor que la del acero [38], al mismo tiempo el grafeno es muy flexible.

Las propiedades ópticas de grafeno también tienen características muy interesantes. Este material absorbe el 2.3% de la luz que incide sobre él en la región del espectro que va del infrarrojo al visible [39]. Además casi no refleja luz transmitiendo el 97.7% de esta.

Existen, sin embargo, varios retos en el estudio de este alótropo, uno muy importante es el estudio de como mitigar el tunelaje perfecto debido a la paradoja de Klein. Otros que vienen a colación son los efectos que sobre propiedades electrónicas, como la conductividad y la resistividad, así como en las propiedades ópticas, como la transmisión o reflexión tiene la radiación electromagnética. **En esta tesis, abordamos principalmente el efecto que sobre las cargas en grafeno tiene la radiación electromagnética, específicamente estudiamos los espectros de energía y las soluciones de la ecuación de Dirac que produce nuestro modelo. Además mostramos que la radiación genera una corriente fuertemente no lineal en este material.**

Antes de entrar en el tema principal de esta tesis permitámonos dar una introducción a conceptos básicos sobre grafeno.

1.1. Estructura electrónica del grafeno.

Abordemos en primer lugar el estudio de la estructura electrónica del grafeno, sobre todo para darnos una idea de que tipo de material vamos a estudiar, es decir, si se trata de un semiconductor, un aislante o un metal.

La estructura electrónica del grafeno se puede obtener usando la aproximación de amarre fuerte. Tal aproximación es válida porque el carbono en los enlaces de grafeno tiene 3 de sus 4 electrones de valencia fuertemente atados a sus vecinos en enlaces tipo σ , y un electrón libre en un orbital tipo p_z , cuya función de onda se traslapa muy poco con la función de onda del electrón del átomo vecino, dando lugar a que la probabilidad de saltos entre vecinos cercanos sea la más apreciable. La estructura cristalina del grafeno consiste de dos subredes triangulares que llamaremos A y B como se muestra en la Fig.1.5. Cabe mencionar que la necesidad de las dos subredes triangulares proviene del hecho de que la red hexagonal original del grafeno no forma una red de Bravais.

Denotando las funciones de onda del electrón en el orbital p_z de las subredes A y B como $\Psi_{n,m}$ y $\Phi_{n,m}$, respectivamente, como se muestra en la Fig.(1.5), las ecuaciones de Schrödinger en la aproximación de amarre fuerte son

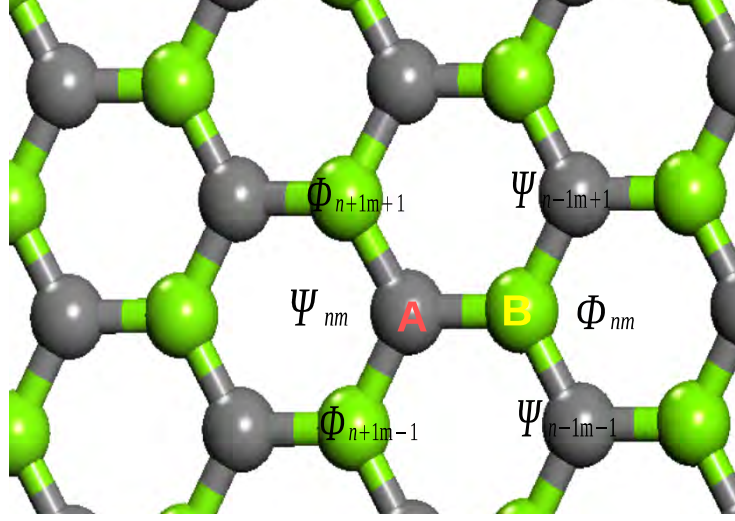


Figura 1.5: Redes triangulares de grafeno y funciones de onda para la red hexagonal. Los átomos en cada red triangular se indican con diferentes colores.

$$\begin{aligned} -t\Phi_{n+1,m-1} - t\Phi_{n+1,m+1} - t\Phi_{n,m} &= E\Psi_{n,m}, \\ -t\Psi_{n-1,m+1} - t\Psi_{n-1,m-1} - t\Psi_{n,m} &= E\Phi_{n,m}, \end{aligned} \quad (1.1)$$

donde todas las integrales de salto, debido a la simetría del problema tienen el valor $t = 2.7eV$, que es el resultado aproximado para grafeno [40].

Como las subredes A y B son redes triangulares de Bravais cada una tiene un conjunto de vectores primitivos dado por Fig.(1.6)

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2} \right), \\ \mathbf{a}_2 &= \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, -\frac{a}{2} \right), \end{aligned} \quad (1.2)$$

Vemos que la norma de cada uno de los vectores es $\|\mathbf{a}_1\| = \|\mathbf{a}_2\| = a$. En consecuencia, la red recíproca puede generarse con los vectores recíprocos

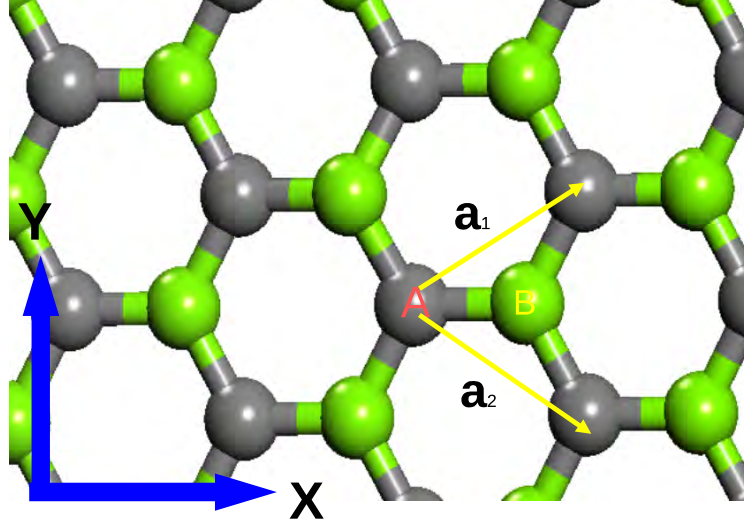


Figura 1.6: Se muestran los vectores primitivos de una de las redes triangulares de las que se compone el grafeno. La norma de los vectores \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 es a .

$$\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad (1.3)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right),$$

donde

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}. \quad (1.4)$$

Puesto que el sistema es periódico, puede aplicarse el teorema de Bloch y las funciones de onda se escriben como

$$\Psi_{n,m} = \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a n}{2} + \frac{ik_y a m}{2}\right) u(\mathbf{k}) \quad (1.5)$$

$$\Phi_{n,m} = \exp\left(\frac{i\sqrt{3}k_x a n}{2} + \frac{ik_y a m}{2}\right) v(\mathbf{k})$$

aquí las funciones $u(k)$ y $v(k)$ son periódicas en el espacio recíproco, esto es

$$\begin{aligned} u(\mathbf{k} + \mathcal{G}) &= u(\mathbf{k}) \\ v(\mathbf{k} + \mathcal{G}) &= v(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (1.6)$$

donde \mathcal{G} es un vector de la red recíproca dado por

$$\mathcal{G} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 \quad (1.7)$$

con n_1 y n_2 enteros.

Las ecuaciones (1.1) y (1.5) producen la siguiente ecuación de eigenvalores

$$\begin{bmatrix} 0 & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^*(\mathbf{k}) & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u(\mathbf{k}) \\ v(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u(\mathbf{k}) \\ v(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

donde

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta(k_x, k_y) = -t - 2t \exp\left(\frac{i\sqrt{3}ak_x}{2}\right) \cos \frac{ak_y}{2} \quad (1.9)$$

obtenemos entonces que el espectro de energías es

$$E = \pm \sqrt{4t^2 \cos^2 \frac{a}{2} k_y + 4t^2 \cos \frac{a}{2} k_y \cos \frac{\sqrt{3}a}{2} k_x + t^2} \quad (1.10)$$

El espectro para el caso en que $t = 1$ se muestra en la Fig.(1.7). Vemos que es simétrico con respecto a $E = 0$, lo cual es consecuencia de que la red es bipartita, debido a que se forma por dos subredes triangulares [41].

Describamos un poco más el espectro. El salto entre subredes produce la formación de dos bandas de energía y su interacción cerca de los bordes de la zona de Brioullin nos lleva a un espectro cónico en los puntos K y K' , que se conocen como puntos de Dirac. Es por esta razón que se considera al grafeno como un semiconductor con banda prohibida de energía de tamaño cero, como mencionamos en la introducción.

Hagamos un análisis más detallado de lo que sucede cerca de los puntos de Dirac. Esto se puede hacer apartir de un desarrollo en serie de Taylor alrededor de, por ejemplo, el punto K . La función que vamos a desarrollar en serie en nuestro caso es $\Delta(k_x, k_y)$.

Recordando que el desarrollo en serie de una función de dos variables $f(\mathbf{x}) = f(x, y)$ alrededor del punto $\mathbf{x}_0 = (x_0, y_0)$ se hace de la siguiente manera:

$$f(\mathbf{x}_0 + \mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \nabla f(\mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \dots \quad (1.11)$$

En nuestro caso tomando las coordenadas del punto K

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right) \quad (1.12)$$

tenemos que la expansión en serie requerida es

$$\Delta(\mathbf{K} + \mathbf{k}) = \left[i\sqrt{3}ae^{i\pi} \cos \frac{\pi}{3}, -ae^{i\pi} \operatorname{sen} \frac{\pi}{3} \right] \cdot (k_x, k_y). \quad (1.13)$$

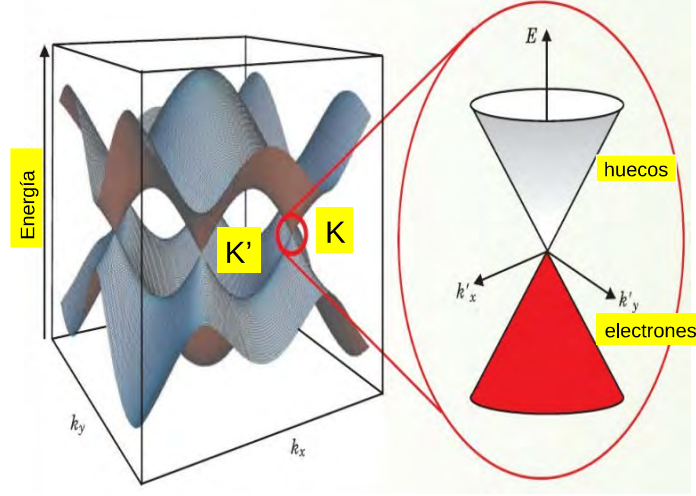


Figura 1.7: Espectro electrónico del grafeno. Alrededor de los puntos K y K', el espectro es cónico.

Los valores numéricos de las cantidades involucradas en esta expresión son

$$\cos \frac{\pi}{3} = \frac{1}{2},$$

$$\text{sen} \frac{\pi}{3} = \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad (1.14)$$

y

$$e^{i\pi} = -1.$$

Luego entonces

$$\Delta(\mathbf{K} + \mathbf{k}) = \frac{\sqrt{3}at}{2} (k_y - ik_x). \quad (1.15)$$

Hagamos ahora un pequeño cambio en la Ec.(1.15) tomemos unos nuevos ejes de tal manera que ahora y se transforme en x' y que x sea el eje y' . Al substituir esta relación transformada en el Hamiltoniano de la Ec(1.8), este se puede escribir como

$$H = \frac{\sqrt{3}}{2\hbar} ta \begin{pmatrix} 0 & \hbar(k_{x'} - ik_{y'}) \\ \hbar(k_{x'} + ik_{y'}) & 0 \end{pmatrix} = v_F \{ \sigma_{x'} \hat{p}_{x'} + \sigma_{y'} \hat{p}_{y'} \}, \quad (1.16)$$

que es el Hamiltoniano de Dirac, donde $\sigma_{x'}$ y $\sigma_{y'}$ son las matrices de Pauli y \hat{p}_i son los operadores de momento lineal. Como resultado, las cuasipartículas en grafeno obedecen una relación de dispersión lineal $E = \hbar v_F \|\mathbf{k}\|$ a bajas energías, siendo el límite hasta 1eV [42]. Esto significa que estamos ante partículas sin masa que se mueven a una velocidad de Fermi de $v_F = \frac{\sqrt{3}}{2\hbar} \hbar v_F = 1 \times 10^6 \text{ m/s}$ que, como su contraparte en la teoría de Dirac, juega el papel de velocidad de la luz. Debemos mencionar que una descripción de este tipo en la que se desprecian efectos de muchos cuerpos ha demostrado ser adecuada tanto teórica como experimentalmente [42], [43].

Las cuasipartículas en grafeno deben entonces ser descritas por la ecuación de Dirac para fermiones sin masa [44]. El espectro lineal no es lo único que caracteriza el transporte cuántico en grafeno [42]. Es también necesario señalar que los estados arriba del cero de energía producen una corriente de tipo electrónica y con carga negativa, mientras que para energías negativas si la banda de valencia no está completamente llena los estados se comportan como huecos cargados positivamente, que se pueden ver como el análogo en materia condensada de los positrones. Hay que notar que los electrones y huecos en materia condensada normalmente se describen por ecuaciones de Schrödinger separadas, que no están conectadas de ninguna manera. En contraste, estados de electrones y huecos en grafeno están interconectados y exhiben propiedades análogas a las de simetría de conjugación de carga como en electrodinámica cuántica. Este hecho se manifiesta en que si se tiene la función de onda para el electrón en un problema determinado, con una transformación de conjugación de carga obtenemos la función de onda para el hueco para el mismo problema.

Las cuasipartículas del grafeno tienen que ser descritas por funciones de onda de dos componentes, descripción que se hace necesaria para definir contribuciones relativas procedentes de las subredes A y B de la red original. La descripción de dos componentes es muy similar a la de las funciones de onda espinoriales en electrodinámica cuántica, pero el espín en el caso de este material bidimensional indica la subred en que se mueve la cuasipartícula y no el espín real y por lo tanto se le conoce como pseudoespín.

Hay más analogías con la electrodinámica cuántica. Como hemos mencionado, el espectro cónico de este alótropo es el resultado de la intersección de las bandas de energía originadas por las subredes A y B, en concordancia, un electrón con energía E propagándose en la dirección positiva se origina de la misma subred del espectro electrónico que un hueco con energía $-E$ propagándose en dirección opuesta. Esto produce que electrones y huecos pertenecientes a la misma subred tengan pseudoespín apuntado en la misma dirección. Pero, que este pseudoespín sea a la vez paralelo al momento para electrones y antiparalelo para huecos, permitiéndonos la introducción de una cantidad llamada quiralidad que es formalmente la proyección del pseudoespín sobre la dirección de movimiento y que es positiva para electrones y negativa para huecos [22].

Pasemos ahora a revisar algunos efectos observados o predichos en grafeno, relevantes para esta tesis.

1.2. Efecto Hall

El tener un efecto Hall cuántico anómalo [27], [14] para grafeno, el cual ha sido comprobado experimentalmente por diversos grupos [45], [16], es quizá, la demostración más fehaciente de tener un sistema descrito por la ecuación de Dirac para fermiones sin masa.

Para sistemas bidimensionales a los que se les aplica un campo magnético perpendicular en relación al plano del sistema, obtenemos un espectro de energía discreto (cuantización de Landau). En el caso de fermiones de Dirac el espectro se obtiene como se detalla a continuación.

El Hamiltoniano en este caso es

$$H = v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.17)$$

donde $\hat{\pi}_i = \hat{p}_i - eA_i/c$ ($i = x, y$) y usamos la siguiente norma $A_x = -\mathcal{B}y$. Luego es necesario resolver la siguiente ecuación de eigenvalores,

$$H\Psi(x, y) = E\Psi(x, y), \quad (1.18)$$

donde el espinor esta dado por

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} \Psi_A(x, y) \\ \Psi_B(x, y) \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

Escribiendo las ecuaciones para $\Psi_A(x, y)$ y $\Psi_B(x, y)$ explícitamente se obtienen las dos ecuaciones acopladas siguientes

$$v_F(\hat{\pi}_x + \hat{\pi}_y)\Psi_B(x, y) = E\Psi_A(x, y), \quad (1.20)$$

$$v_F(\hat{\pi}_x - \hat{\pi}_y)\Psi_A(x, y) = E\Psi_B(x, y), \quad (1.21)$$

con $v_F \sim 1 \times 10^6$. El desacoplamiento de las ecuaciones anteriores se logra al multiplicar la Ec.(1.20) por $v_F(\hat{\pi}_x - \hat{\pi}_y)$ y la Ec.(1.21) por $v_F(\hat{\pi}_x + \hat{\pi}_y)$ y usar el conmutador,

$$[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] = i \frac{\hbar e \mathcal{B}}{c}. \quad (1.22)$$

Se obtiene entonces la siguiente ecuación para el espinor $\Psi(x, y)$,

$$\left[v_F^2(\pi_x^2 + \pi_y^2) - \frac{\hbar e \mathcal{B} v_F^2}{c} \sigma_z \right] \Psi(x, y) = E^2 \Psi(x, y), \quad (1.23)$$

que puede reescribirse de la siguiente manera

$$v_F^2 \left[\hat{p}^2 + \frac{e^2 \mathcal{B}^2}{c^2} y^2 - \frac{2e\mathcal{B}}{c} \left(\frac{1}{2} \hbar \sigma_z - \hat{p}_x y \right) \right] \Psi(x, y) = E^2 \Psi(x, y). \quad (1.24)$$

Tomando una solución del tipo

$$\Psi(x, y) = \mathbf{Y}(y) e^{ip_x x / \hbar}, \quad (1.25)$$

podemos escribir la siguiente ecuación para $\mathbf{Y}(y)$

$$v_F^2 \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \left(\frac{e\mathcal{B}y}{c} + p_x \right)^2 \right] \mathbf{Y}(y) = \left(E^2 + \frac{2e\mathcal{B}v_F^2}{c} \left[\frac{1}{2} \hbar \sigma_z \right] \right) \mathbf{Y}(y). \quad (1.26)$$

Al dividir esta por $\hbar e \mathcal{B} v_F^2 / c$ se obtiene

$$\left[-\frac{\hbar c}{e\mathcal{B}} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{e\mathcal{B}}{\hbar c} \left(y + \frac{cp_x}{e\mathcal{B}} \right)^2 \right] \mathbf{Y}(y) = E' \mathbf{Y}(y), \quad (1.27)$$

donde se ha definido,

$$E' = \frac{E^2 + 2e\mathcal{B}v_F^2/c (\frac{1}{2}\hbar\sigma_z)}{\hbar e\mathcal{B}v_F^2/c}, \quad (1.28)$$

haciendo el cambio de variable,

$$\xi = \sqrt{\frac{e\mathcal{B}}{\hbar c}} \left(y + \frac{cp_x}{e\mathcal{B}} \right) \quad (1.29)$$

obtenemos la ecuación,

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right) \mathbf{Y}(\xi) = E' \mathbf{Y}(\xi). \quad (1.30)$$

Esta última ecuación es la ecuación de un oscilador armónico con $\hbar = 2m = 1$ y con frecuencia $\omega = 2$.

Las funciones de onda de este oscilador armónico y sus respectivas energías son

$$\mathbf{Y}(\xi) = N H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (1.31)$$

$$E'_n = 2(n + 1/2) \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (1.32)$$

donde el factor N en las funciones de onda es un factor de normalización y H_n es el polinomio de Hermite [46]

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x^2} \right) \quad (1.33)$$

Con las Ecs. (1.32) y (1.28) se obtiene finalmente el siguiente espectro

$$E_\nu = \sqrt{2 |e| \mathcal{B} \hbar v_F^2 / c (\nu + 1/2 \pm 1/2)} \quad (1.34)$$

donde el término con $\pm 1/2$ viene del $1/2\sigma_z$ y está conectado con la quiralidad. En contraste en el caso usual de un semiconductor en que se tiene una relación de dispersión parabólica, la secuencia de Landau es $E = \hbar\omega_c(n + 1/2)$ donde ω_c es la frecuencia de rotación en el campo magnético (frecuencia de ciclotrón) y n es un número entero.

Una importante peculiaridad para los niveles de Landau en el caso de fermiones de Dirac sin masa es la existencia de estados con energía cero (con $\nu = 0$ y el signo menos en la Ec.(1.34)) Esta situación difiere sustancialmente de la del caso usual de otros semiconductores que tienen bandas parabólicas dado que el primer nivel de Landau esta en $\hbar\omega_c/2$. La existencia de este nivel de Landau de cero energía es lo que nos lleva a tener un efecto Hall cuántico anómalo que muestra una escalera equidistante de escalones que persiste incluso a través del punto de Dirac (vértice del cono, ver Fig.(1.7)), donde las cargas cambian de electrones a huecos. La secuencia de la conductividad se modifica con respecto a la secuencia estandar del efecto Hall cuántico por un factor de $1/2$, quedando de la siguiente manera

$$\sigma_{xy} = \pm \frac{4e^2}{h} (N + 1/2) \quad (1.35)$$

donde N es el índice del nivel de Landau y el factor 4 proviene de la doble degeneración del espín y la doble degeneración debida a los valles. Usualmente, todos los niveles de Landau tienen la misma degeneración

(número de estados electrónicos con una energía dada) que es proporcional al flujo magnético a través del sistema. Como resultado, las mesetas o escaleras en la conductividad correspondientes al llenado de los primeros niveles ν son enteros. Para el caso de los fermiones de Dirac sin masa, los niveles con una energía distinta de cero son doblemente degenerados. Por ejemplo, el estado de energía proporcional a \sqrt{p} se obtienen con $\nu = p$ y el signo menos en la quiralidad y con $\nu = p - 1$ y el signo más en la quiralidad.

En lo que respecta al efecto Hall cuántico fraccionario trabajos de noviembre de 2009 [47], [48] mencionan que se observó el estado con $(N+1/2) = 1/3$ a una temperatura aproximada de 20 K en muestras de grafeno suspendido.

1.3. Paradoja de Klein

Otro de los efectos importantes en grafeno es el de la paradoja de Klein. El término paradoja de Klein [23] se refiere usualmente al proceso relativista contraintuitivo en el cual un electrón penetra a través de una barrera de potencial de altura V_0 si esta excede el doble de la energía en reposo de este mc^2 (m es la masa del electrón). En este caso, la probabilidad de transmisión T depende débilmente de la altura de la barrera y se aproxima a transparencia perfecta para barreras de potencial que sean mayores a $2mc^2$, en contraste con el caso de tunelaje no relativista donde T decae exponencialmente con el incremento de V_0 . Este efecto puede atribuirse a que, aun cuando se tenga una barrera de potencial suficientemente alta y sea repulsiva para electrones, esta es atractiva para huecos y resulta en estados positrónicos en el interior de la barrera. El perfecto acoplamiento entre funciones de onda de electrones y huecos en el borde de la barrera produce una probabilidad alta de tunelaje conocido como paradoja de Klein.

Hagamos el cálculo teórico de la implementación del experimento de la paradoja de Klein para el caso de grafeno. El esquema general de experimento se muestra en la Fig.(1.8) donde se considera una barrera de potencial que tiene una forma rectangular de la siguiente forma en la dirección x

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < D \\ 0 & \text{para cualquier otro intervalo} \end{cases}, \quad (1.36)$$

y es infinita a lo largo del eje y .

Es sencillo resolver el problema de tunelaje para electrones de Dirac en grafeno. Asumiendo que el electrón incidente se propaga con un ángulo ϕ respecto del eje x y tomando las componentes del espinor de Dirac Ψ_A y Ψ_B para el hamiltoniano

$$H = v_F \sigma \cdot \hat{\mathbf{p}} + V(x), \quad (1.37)$$

de la siguiente forma

$$\Psi_A(x, y) = \begin{cases} (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y} & x < 0 \\ (a e^{iq_x x} + b e^{-iq_x x}) e^{ik_y x} & 0 < x < D \\ t e^{ik_x x + ik_y y} & x > D \end{cases}, \quad (1.38)$$

$$\Psi_B(x, y) = \begin{cases} s (e^{ik_x x + i\phi} - r e^{-ik_x x - i\phi}) e^{ik_y y} & x < 0 \\ s' (a e^{iq_x x + i\theta} - b e^{-iq_x x - i\theta}) e^{ik_y y} & 0 < x < D \\ s t e^{ik_x x + ik_y y + i\phi} & x > D \end{cases}, \quad (1.39)$$

donde $k_F = 2\pi/\lambda$ es el vector de onda de Fermi, $k_x = k_F \cos \phi$ y $k_y = k_F \sin \phi$ son las componentes del vector de onda fuera de la barrera $q_x = \sqrt{(E - V_0)^2/\hbar^2 v_F^2 - k_y^2}$, $\theta = \tan^{-1}(k_y/q_x)$ es el ángulo de

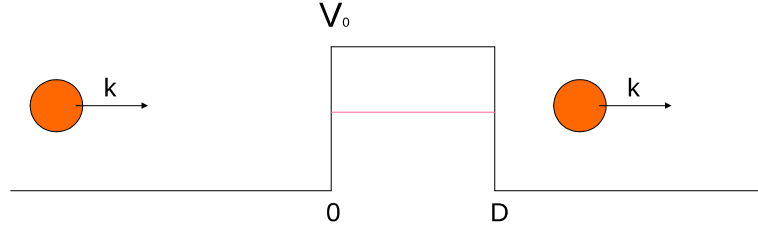


Figura 1.8: Barrera de potencial para la implementación del experimento de la paradoja de Klein. El electrón se trasmite con probabilidad uno através de la barrera.

refracción y $s = \text{signo } E$, $s' = \text{signo } (E - V_0)$. Podemos encontrar de las condiciones de continuidad de la función de onda en las fronteras 0 y D los coeficientes a , b , t y r . La expresión obtenida para el coeficiente de reflexión r es,

$$r = 2ie^{i\phi} \text{sen}(q_x D) \times \frac{\text{sen}\phi - ss' \text{sen}\theta}{ss' [e^{-iq_x D} \cos(\phi + \theta) + e^{iq_x D} \cos(\phi - \theta)] - 2i \text{sen}(q_x D)}. \quad (1.40)$$

La Fig.(1.9) muestra ejemplos de la dependencia angular del coeficiente de transmisión $T = |t|^2 = 1 - |r|^2$ calculado usando la expresión anterior. En el límite de barreras muy altas $|V_0| > |E|$, la expresión para T puede simplificarse del siguiente modo

$$T = \frac{\cos^2 \phi}{1 - \cos^2(q_x D) \text{sen}^2 \phi}. \quad (1.41)$$

Las Ecs. (1.40) y (1.41) producen que la barrera sea perfectamente transparente para ángulos cercanos a incidencia normal $\phi = 0$. Estas ecuaciones también producen que, existan condiciones resonantes cuando $q_x D = \pi N$, $N = 0, \pm 1, \dots$, en esos casos la barrera se vuelve transparente. Comparemos con el resultado para este mismo problema cuando se usa teoría no relativista. Para un estudio basado en la ecuación de Schrödinger con una partícula de masa m , se obtiene para el coeficiente de transmisión, la siguiente expresión

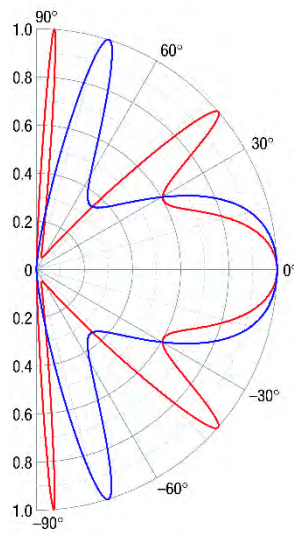


Figura 1.9: Coeficiente de transmisión para el caso de grafeno. Las líneas son ejemplos de la dependencia angular de este coeficiente. La línea más oscura corresponde a una barrera de altura $V_0 = 285\text{meV}$ y la línea más clara corresponde a $V_0 = 200\text{meV}$. Se observa, en ambos casos que este es igual a 1 cuando $\phi = 0$.

$$T = \frac{1}{1 + (k^2 + q^2/2kq)^2 \sinh^2 qD} \quad (1.42)$$

donde $q^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$ y $k^2 = 2mE/\hbar^2$, con E la energía inicial de la partícula. De esta ecuación vemos que en el caso de que $qD \gg 1$, podemos aproximar el seno hiperbólico con una exponencial

$$\sinh qD = \frac{1}{2} (e^{qD} - e^{-qD}) \approx \frac{1}{2} e^{qD}, \quad (1.43)$$

para obtener que la Ec.(1.42), es simplemente

$$T = \left(\frac{4kq}{k^2 + q^2} \right)^2 e^{-2qD}. \quad (1.44)$$

Vemos entonces que para el límite $qD \gg 1$, la partícula se transmite poco a diferencia del caso de grafeno y sus condiciones resonantes.

1.4. Conductividad mínima

Otra de las peculiaridades importantes que se han encontrado para el grafeno es que exhibe una conductividad mínima, que es la conductividad en el punto de Dirac donde $E = 0$, de tal manera que la densidad de cargas también es cero. La conductividad mínima es una cantidad medida en el límite de corriente directa DC a temperatura $T = 0$. Experimentalmente se ha encontrado que se aproxima a cuatro veces el cuanto de conductividad $\sigma^{\min} = 4e^2/h$ [45], mientras que teóricamente se han encontrado diversos valores para esta conductividad mínima que van desde $\sigma^{\min} = \pi e^2/2h$ usando la fórmula de Kubo[49], [50], hasta $\sigma^{\min} = 4e^2/\pi h$, obtenidas usando la fórmula de Kubo [50] y la fórmula de Landauer [51].

En los artículos de las referencias [50] y [51], se hace hincapié en que la discrepancia en los valores obtenidos teóricamente tiene su origen principalmente en que en los cálculos se obtiene las integrales del producto de deltas, que son objetos que se tienen que manejar con mucho cuidado. De esta manera, el autor de la referencia [50], menciona que se pueden obtener valores distintos si se hace la integral sobre las energías primero y después se toma el límite de corriente directa o si este proceso se hace al revés.

Usando la fórmula de Kubo el cálculo de la conductividad mínima se hace de la siguiente manera. Tomemos primero la expresión para la conductividad $\sigma_{\mu\nu}$ de la Ref.[52]

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu}(\omega) &= \frac{ie^2}{\hbar} \int \int Tr \{ [H, r_\mu] \delta(H - \epsilon') [H, r_\nu] \delta(H - \epsilon) \} \\ &\times \frac{1}{\epsilon - \epsilon' + \omega - i\alpha} \frac{f(\epsilon') - f(\epsilon)}{\epsilon - \epsilon'} d\epsilon d\epsilon', \end{aligned} \quad (1.45)$$

donde los índices μ, ν se refieren a las coordenadas x, y , H es el hamiltoniano del sistema, r_μ la posición de la partícula, ω es la frecuencia del campo externo, α es la razón a la que el campo externo se prende o apaga, $\delta(x)$ es la función delta de Dirac y $f(\epsilon) = (1 + \exp(\beta\epsilon))^{-1}$ es la distribución de Fermi con $\beta = 1/k_B T$. Al tomar el límite $\alpha \rightarrow 0$ tenemos la siguiente relación,

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon - \epsilon' + \omega - i\alpha} = P \left\{ \frac{1}{\epsilon - \epsilon' + \omega} \right\} - i\pi \delta(\epsilon - \epsilon' + \omega),$$

donde P indica la parte principal de la integral. Por lo tanto, la parte real de la Ec.(1.45) correspondiente a la conductividad es,

$$\begin{aligned}\sigma_{\mu\nu}(\omega) &= \frac{\pi e^2}{\hbar} \int \int Tr\{[H, r_\mu]\delta(H - \epsilon')[H, r_\nu]\delta(H - \epsilon)\} \\ &\quad \times \frac{f(\epsilon') - f(\epsilon)}{\epsilon - \epsilon'} d\epsilon d\epsilon' \delta(\epsilon - \epsilon' + \omega) \\ \sigma_{\mu\nu}(\omega) &= \frac{\pi e^2}{\hbar} \int Tr\{[H, r_\mu]\delta(H - \epsilon - \omega)[H, r_\nu]\delta(H - \epsilon)\} \\ &\quad \times \frac{f(\epsilon + \omega) - f(\epsilon)}{\omega} d\epsilon.\end{aligned}\tag{1.46}$$

Evaluemos la traza que se encuentra en el interior de la integral anterior. Para hacer esto necesitamos saber que el Hamiltoniano de Dirac para describir partículas en grafeno con vector de onda (k_x, k_y) viene dado por

$$H = v_F \hbar (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y),\tag{1.47}$$

donde σ_j ($j = x, y, z$) son las matrices de Pauli. Los eigenestados de este Hamiltoniano son:

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm e^{-i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix},\tag{1.48}$$

aquí el $+$ corresponde a electrones, el $-$ a huecos y $\tan\varphi = \frac{k_y}{k_x}$. Las energías de estos eigenestados son $\hbar v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \hbar v_F \|k\|$ para electrones y $-\hbar v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = -\hbar v_F \|k\|$ para huecos. Por otro lado, el operador de corriente se modifica bajo una transformación de Fourier de la siguiente manera

$$j_\mu = -ie[H, r_\mu] \rightarrow e \frac{\partial H}{\partial k_\mu}.\tag{1.49}$$

Luego el término de la traza en la Ec.(1.46) puede escribirse como

$$\begin{aligned}T(\epsilon) &= Tr\{[H, r_\mu]\delta(H - \epsilon - \omega)[H, r_\nu]\delta(H - \epsilon)\} \\ &= \int Tr \left\{ \frac{\partial H}{\partial k_\mu} \delta(H - \epsilon - \omega) \frac{\partial H}{\partial k_\nu} \delta(H - \epsilon) \right\} \frac{dk^2}{(2\pi)^2},\end{aligned}\tag{1.50}$$

considerando $\mu = \nu = y$, esta expresión se transforma en

$$\begin{aligned}T(\epsilon) &= \int Tr \{v_F \sigma_y \delta(H - \epsilon - \omega) v_F \sigma_y \delta(H - \epsilon)\} \frac{dk^2}{(2\pi)^2} \\ &= v_F^2 \int \sum_{m,n} \langle m | \sigma_y \delta(H - \epsilon - \omega) | n \rangle \langle n | \sigma_y \delta(H - \epsilon) | m \rangle \frac{dk^2}{(2\pi)^2},\end{aligned}\tag{1.51}$$

para simplificar los cálculos hagamos el cambio de variable $\epsilon \rightarrow \epsilon + \omega/2$. Se obtiene para la traza la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
T(\epsilon) &= v_F^2 \int \frac{k_x^2}{k^2} \left[\delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \right. \\
&\quad \left. + \delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \right] \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \\
&\quad + v_F^2 \int \frac{k_y^2}{k^2} \left[\delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \right. \\
&\quad \left. + \delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \right] \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2},
\end{aligned} \tag{1.52}$$

cambiando a coordenadas polares y usando el hecho de que,

$$\frac{k_x^2}{k^2} = \cos^2 \varphi \quad y \quad \frac{k_y^2}{k^2} = \sin^2 \varphi \tag{1.53}$$

tenemos,

$$\begin{aligned}
T(\epsilon) &= v_F^2 \int_0^\lambda \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi \left[\delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \right. \\
&\quad \left. + \delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \right] \frac{k dk d\varphi}{(2\pi)^2} \\
&\quad + v_F^2 \int_0^\lambda \int_0^{2\pi} \sin^2 \varphi \left[\delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \right. \\
&\quad \left. + \delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \right] \frac{k dk d\varphi}{(2\pi)^2},
\end{aligned} \tag{1.54}$$

donde λ es una energía de corte. Haciendo la integral angular se obtiene

$$\begin{aligned}
T(\epsilon) &= \pi v_F^2 \int_0^\lambda \left[\delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \right. \\
&\quad \left. + \delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \right] \frac{k dk}{(2\pi)^2} \\
&\quad + \pi v_F^2 \int_0^\lambda \left[\delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \right. \\
&\quad \left. + \delta \left(v_F k + \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \delta \left(v_F k - \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \right] \frac{k dk}{(2\pi)^2}.
\end{aligned} \tag{1.55}$$

Haciendo el cambio de variable $\kappa = v_F k$, podemos simplificar la expresión anterior de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
T(\epsilon) &= \pi \int_0^\lambda \left[\delta \left(\kappa + \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \delta \left(\kappa + \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) + \delta \left(\kappa - \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \delta \left(\kappa - \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \right] \frac{\kappa d\kappa}{(2\pi)^2} \\
&\quad + \pi \int_0^\lambda \left[\delta \left(\kappa - \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) \delta \left(\kappa + \frac{\omega}{2} - \epsilon \right) + \delta \left(\kappa + \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \delta \left(\kappa - \frac{\omega}{2} + \epsilon \right) \right] \frac{\kappa d\kappa}{(2\pi)^2}.
\end{aligned} \tag{1.56}$$

Para realizar el cálculo de las integrales de productos de dos deltas, consideremos una delta de Dirac suave como la que escribimos a continuación

$$\delta_\eta(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2} = -\frac{1}{2i\pi} \left[\frac{1}{x + i\eta} - \frac{1}{x - i\eta} \right] \quad (1.57)$$

tomando $\eta \sim 0$ la integral del producto de deltas de Dirac se puede escribir como

$$\begin{aligned} \int_0^\lambda \delta_\eta(k-a)\delta_\eta(k-b)kdk &\sim (a+b)\delta_\eta(a-b)\frac{1}{8}[\Theta(\lambda-a) + \Theta(a) + \Theta(\lambda-b) + \Theta(b) - 2] \\ &\quad - \frac{\eta}{a-b} \frac{1}{2\pi} [\Theta(\lambda-b) + \Theta(b) - \Theta(\lambda-a) - \Theta(a)]. \end{aligned} \quad (1.58)$$

si además se asume que $\eta, \omega \ll \lambda$, se obtiene

$$T(\epsilon) \sim \frac{\pi}{(2\pi)^2} \left(\frac{\omega}{4} \delta_\eta(\epsilon) + \frac{\eta}{\pi\omega} \right) \Theta \left(\lambda - \frac{\omega}{2} \right) \quad (1.59)$$

La conductividad dependiente de la temperatura puede calcularse de las Ecs. (1.46) y (1.59) y resulta en

$$\begin{aligned} \sigma_{22}(\omega) &= -\frac{\pi e^2}{\hbar} \int T(\epsilon) \frac{f(\epsilon + \omega/2) - f(\epsilon - \omega/2)}{\omega} d\epsilon \\ &\sim -\frac{\pi e^2}{8h} \left[f\left(\frac{\omega}{2}\right) - f\left(-\frac{\omega}{2}\right) \right] + \frac{e^2}{2h} \frac{\eta}{\omega^2} \int_{-\omega/2}^{\omega/2} \frac{\text{senh}(\beta\omega/2)}{\cosh(\beta\epsilon) + \cosh(\beta\omega/2)} d\epsilon \end{aligned} \quad (1.60)$$

lo que puede reescribirse como

$$\sigma_{22}(\omega) \sim \frac{\pi e^2}{8h} \tanh \frac{\beta\omega}{4} + \frac{e^2}{2h} \frac{\eta}{\omega^2} \int_{-\omega/2}^{\omega/2} \frac{\text{senh}(\beta\omega/2)}{\cosh(\beta\epsilon) + \cosh(\beta\omega/2)} d\epsilon \quad (1.61)$$

resultado válido para $\omega < 2\lambda$. Para $\omega > 2\lambda$ se tiene que $\sigma_{22} = 0$. La integral en el segundo término da

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\omega} \int_{-\omega/2}^{\omega/2} \frac{\text{senh}(\beta\omega/2)}{\cosh(\beta\epsilon) + \cosh(\beta\omega/2)} d\epsilon \\ &= \frac{4}{\beta\omega} \text{arc tanh} \left[\tanh^2 \left(\frac{\beta\omega}{4} \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.62)$$

Puede usarse la relación

$$\text{arc tanh}(x) = \frac{1}{2} \log \left[\frac{1+x}{1-x} \right], \quad (1.63)$$

para obtener que la conductividad es

$$\sigma_{22}(\omega) \sim \frac{\pi e^2}{8h} \tanh \frac{\beta\omega}{4} + \frac{e^2}{h} \frac{\beta\eta}{(\beta\omega)^2} \log \left[\frac{1 + \tanh^2(\beta\omega/4)}{1 - \tanh^2(\beta\omega/4)} \right]. \quad (1.64)$$

Hay dos límites asintóticos para la expresión

$$\frac{\beta\eta}{(\beta\omega)^2} \log \left[\frac{1 + \tanh^2(\beta\omega/4)}{1 - \tanh^2(\beta\omega/4)} \right] \sim \begin{cases} 1/8 & \text{para } \beta\omega \sim 0 \\ 1/2\beta\omega & \text{para } \beta\omega \sim \infty \end{cases} \quad (1.65)$$

lo que produce que la conductividad sea

$$\sigma_{22}^{\min}(\omega) = \frac{e^2}{8h} \begin{cases} \beta\eta & \text{para } \beta\omega \sim 0 \\ \pi + 4\beta\eta/\beta\omega & \text{para } \beta\omega \sim \infty \end{cases} \quad (1.66)$$

tomando en cuenta la degeneración por el espín y por los valles, lo que significa multiplicar por 4 la expresión anterior se obtiene finalmente

$$\sigma_{22}^{\min}(\omega) = \frac{e^2}{2h} \begin{cases} \beta\eta & \text{para } \beta\omega \sim 0 \\ \pi + 4\beta\eta/\beta\omega & \text{para } \beta\omega \sim \infty \end{cases} \quad (1.67)$$

vemos que en límite de temperatura cero se obtiene para la conductividad $\sigma_{22}^{\min}(\omega) = \pi e^2/2h$, más un término adicional. Experimentalmente es más importante estudiar la conductividad a una temperatura diferente de cero, es decir, en el límite $\beta\omega \sim 0$, esto produce que la conductividad dependa de la razón de dispersión de la siguiente manera $\sigma_{22}^{\min}(\omega) \sim \beta\eta$.

1.5. Propiedades ópticas del grafeno.

Estudiemos como última parte de este capítulo las propiedades ópticas del grafeno. Este material tiene unas propiedades ópticas muy interesantes que se pueden describir a partir de los coeficientes de reflexión y transmisión. Para obtener estos coeficientes notemos primero que las amplitudes de reflexión y transmisión están dadas por las siguientes expresiones

$$r = \frac{1 - C}{1 + C}, \quad (1.68)$$

$$t = \frac{2}{1 + C}, \quad (1.69)$$

donde para el caso en que el grafeno se encuentra suspendido en el vacío, el coeficiente C está dado por [53]

$$C = 1 + \frac{4\pi}{c} \sigma(\omega) \cos \theta. \quad (1.70)$$

En esta ecuación θ es el ángulo de incidencia, c es la velocidad de la luz y $\sigma(\omega)$ es la conductividad AC o dinámica. A temperatura cero, la conductividad dinámica contiene un término de Drude debido a las transiciones intrabanda y un término constante debido a las transiciones interbanda [53], [54].

$$\text{Re } \sigma(\omega) = \frac{8\pi e^2}{h^2} |\mu| \frac{\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} + \frac{e^2}{4\hbar} \Theta(\omega - 2\mu), \quad (1.71)$$

aquí μ es potencial químico, τ es el tiempo entre colisiones y ω es la frecuencia del campo externo aplicado. El coeficiente de transmisión $|t|^2$ puede calcularse con ayuda de las Ecs. (1.69), (1.70) y (1.71). Uno puede ver que la desviación de este coeficiente con respecto a la unidad es proporcional al parámetro

adimensional $e^2\mu/\hbar c\omega$, el cual es relativamente grande para frecuencias bajas $\omega \approx e^2\mu/\hbar c$, donde el término de la conductividad intrabanda es el más importante. En el caso de frecuencias altas, el término constante de la conductividad debido a las transiciones intrabanda es el que juega el papel más importante. En ese caso, la transmisión no depende de la frecuencia sino que es controlada por la constante de estructura fina $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$. Por ejemplo, a incidencia normal el coeficiente de transmisión es

$$|t|^2 = 1 - \frac{4\pi}{c} \operatorname{Re} \sigma(\omega) = 1 - \pi\alpha \approx 1 - \frac{3}{137}, \quad (1.72)$$

entonces el grafeno transmite el 97.7% de la luz en la región del espectro que va del infrarrojo al visible como se ha comprobado experimentalmente [39]. El 2.3% de luz restante es absorbida por este material siendo por ello un material muy opaco, esta característica es muy sorprendente considerando que se trata de una monocapa de átomos de carbono [39].

Capítulo 2

Portadores de carga en sólidos bajo campos electromagnéticos

Dado que en esta tesis se estudiará el problema de electrones en una red periódica bidimensional bajo campos electromagnéticos, conviene realizar una revisión integral del tema. Por ello, en este capítulo iniciaremos la revisión del problema de electrones de Bloch sujetos a campos eléctricos estáticos, cuyo análisis da lugar a las oscilaciones de Bloch [55] y al tunelaje Zener [56]. Otro de los tópicos que abordaremos y que es un campo de estudio muy activo en esta área, es el estudio de electrones en espacios bidimensionales sujetos a campos magnéticos perpendiculares constantes, conducente al efecto efecto Hall cuántico [57] y al efecto Hall cuántico fraccionario [58]. Por otra parte, este mismo problema se puede estudiar considerando además que los electrones se mueven en la estructura periódica de un cristal. Como consecuencia de esto, se obtiene que el problema puede reducirse al problema de un electrón en un campo cuasiperiódico, descrito por la llamada ecuación de Harper. El espectro de energías resulta ser un fractal [59] (conocido como mariposa de Hofstadter). Es importante mencionar que en el transcurso de la revisión de este último tema surgió un problema importante que, aunque no formaba parte integral del trabajo, también fue estudiado. El problema que surgió fue el de entender la relación entre el potencial de la ecuación de Harper con el de otro potencial cuasiperiódico famoso: el potencial de Fibonacci. En este capítulo, esta discusión también es incluida. Otro problema que abordamos fué encontrar el espectro de energías para el caso de grafeno bajo un campo magnético constante. Sin embargo, al revisar extensamente la literatura encontramos que este problema ya había sido resuelto por R. Rammal en 1985 [60].

Otro de los tópicos que exploraremos y que fue una de las principales motivaciones para comenzar la investigación realizada en esta tesis es el estudio de electrones sujetos a radiación y campos magnéticos constantes. A este respecto a principios del siglo veinte se reportaron estudios experimentales, donde se menciona la aparición de estados de resistencia cero en muestras de GaAs/Al_xGa_{1-x} [62]-[65]. En la última sección de este capítulo, presentamos una revisión de un tratamiento teórico que corrobora estos resultados [66].

2.1. Electrones en una red periódica con campo eléctrico constante

Para comenzar este capítulo hagamos una revisión de lo que sucede a los electrones en una red periódica a los que se les aplica un campo eléctrico estático y constante. De acuerdo con el trabajo de Bloch [55], los electrones en tal situación oscilarán con una frecuencia $\omega_B = e\mathcal{E}a/\hbar$, en un espacio L proporcional al ancho de la banda en la cual se mueven e inversamente proporcional al campo eléctrico aplicado.

Esta conclusión se puede obtener fácilmente de un tratamiento semiclásico, en el cual se considera que los electrones no sufren dispersión alguna. La ecuación semiclásica de movimiento para un electrón con vector de onda k paralelo a el campo eléctrico \mathcal{E} es

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -e\mathcal{E}, \quad (2.1)$$

donde e es la carga del electrón. La solución de esta última ecuación esta dada por

$$k(t) = k(0) - \frac{e\mathcal{E}t}{\hbar}. \quad (2.2)$$

Este resultado se conoce como el teorema de aceleración y nos dice que el electrón se aceleraría infinitamente si se encontrara en un espacio libre, sin embargo, este hecho no se produce pues el electrón al moverse en una red periódica sufre una reflexión de Bragg al borde de la zona de Brioullin. Veamos esto más explícitamente, recordando que en la aproximación de amarre fuerte la energía de este electrón es

$$E(k) = -\frac{\Delta}{2} \cos ka, \quad (2.3)$$

donde a es el parámetro de la red y Δ el ancho de banda. Tenemos entonces que la velocidad en el espacio k

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk} \quad (2.4)$$

para un electrón en la red viene dada por

$$v(t) = \frac{a\Delta}{2\hbar} \text{sen}(k(t)a), \quad (2.5)$$

como consecuencia la posición en el espacio real con condiciones iniciales $x(t=0) = 0$ es

$$x(t) = \int v(t)dt = \int v(k) \frac{dt}{dk} dk = \int \left(-\frac{\hbar}{e\mathcal{E}} \right) \left(\frac{a\Delta}{2\hbar} \right) \text{sen}(k(t)a) dk, \quad (2.6)$$

por lo tanto,

$$x(t) = \frac{\Delta}{2e\mathcal{E}} \left[\cos \left(k(0)a - \frac{e\mathcal{E}at}{\hbar} \right) - \cos(k(0)a) \right], \quad (2.7)$$

el cual es un movimiento oscilatorio con frecuencia $\omega_B = e\mathcal{E}a/\hbar$ y que se mueve en un espacio $L = \Delta/e\mathcal{E}$. Vemos entonces que si un electrón pudiera viajar una distancia mayor que las dimensiones de la zona Brillouin en el espacio k , sería posible para un campo eléctrico constante inducir una corriente alterna.

Esto, sin embargo, no es posible debido a que normalmente un electrón sufre una colisión antes de llegar al borde de la zona. Por ejemplo, para un campo eléctrico del orden de $10^{-2}V/cm$ y un tiempo de relajación del orden de $10^{-14}s$, $e\mathcal{E}\tau/\hbar$ es del orden de $10^{-1}cm^{-1}$. La dimensión de la zona de Brillouin es del orden de $1/a \sim 10^8 cm^{-1}$.

El resultado anterior también se puede obtener cuánticamente y arroja exactamente los mismos resultado que el tratamiento semiclásico. En el caso cuántico el problema puede describirse mediante el siguiente Hamiltoniano en la aproximación de amarre fuerte [67]

$$H = -\frac{\Delta}{4} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) + ae\mathcal{E} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} n |n\rangle \langle n|, \quad (2.8)$$

donde $|n\rangle$ es el estado de Wannier localizado en el sitio n . Alternativamente, uno puede usar la representación en ondas de Bloch

$$|k\rangle = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} |n\rangle \langle n| k\rangle = \sqrt{\frac{a}{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} |n\rangle e^{inka} \quad (2.9)$$

que satisface la condición de Bloch $\langle n+1| k\rangle = e^{ika} \langle n| k\rangle$ con cuasimomento k confinado a la zona de Brillouin $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$. Usando las siguiente identidades

$$\sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \langle k'| n+1\rangle \langle n| k\rangle = e^{-ik'a} \frac{a}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} e^{in(k-k')a} = \delta(k' - k) e^{-ika}, \quad (2.10)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{n=\infty} n \langle k'| n\rangle \langle n| k\rangle = \frac{a}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} n e^{in(k-k')a} = \delta(k' - k) \frac{i}{a} \frac{d}{dk}, \quad (2.11)$$

obtenemos que el el hamiltoniano Ec.(2.8) es diagonal, $\langle k'| H |k\rangle = a\delta(k' - k) H(k)$, con

$$H(k) = -\frac{\Delta}{2} \cos(ka) + ie\mathcal{E} \frac{d}{dk}, \quad (2.12)$$

donde el primer término es la relación de dispersión para el caso en que no hay campo eléctrico,

$$E(k) = -\frac{\Delta}{2} \cos ka. \quad (2.13)$$

Los eigenestados del Hamiltoniano (2.12), conocidos como estados de Wannier-Stark $\langle k| \Psi\rangle = \Psi(k)$, se obtienen inmediatamente de la integración de la siguiente ecuación diferencial

$$-\frac{\Delta}{2} \cos kd\Psi(k) + ie\mathcal{E} \frac{d\Psi(k)}{dk} = E\Psi(k), \quad (2.14)$$

que junto con la condición de periodicidad $\Psi(k + 2\pi/a) = \Psi(k)$, produce las energías

$$E_m = me\mathcal{E}a, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.15)$$

A este espectro se le conoce como la escalera de Wannier-Stark. Los eigenestados correspondientes son,

$$\Psi_m(k) = \langle k| \Psi_m\rangle = \sqrt{\frac{a}{2\pi}} e^{-i[mka + \gamma \text{sen}(ka)]}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (2.16)$$

con

$$\gamma = \frac{\Delta}{2ae\mathcal{E}}, \quad (2.17)$$

los cuales estan normalizadas respecto a la zona de Brioullin $|k| \leq \pi/a$.

La descripción en términos de los estados de Wannier es un poco mas elaborada. La transformación de Fourier produce

$$\begin{aligned} \Psi_m(n) &= \langle n | \Psi_m \rangle = \int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} dk \langle n | k \rangle \langle k | \Psi_m \rangle \\ &= \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} dk e^{i[(n-m)ka - \gamma senka]} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} du e^{i[(n-m)u - \gamma sen u]} = J_{n-m}(\gamma) \end{aligned} \quad (2.18)$$

debido a la representación integral de la función de Bessel [68]. Esto nos lleva a los estados de Wannier-Stark en la representación de Wannier [69]

$$|\Psi_m\rangle = \sum_n J_{n-m}(\gamma) |n\rangle. \quad (2.19)$$

De las propiedades de las funciones de Bessel [68], se obtiene que $J_{n-m}(\gamma)$ son funciones localizadas en el intervalo $|m-n| < \gamma$, es decir, estos estados son estados localizados y se extienden sobre el intervalo espacial

$$L = 2\gamma a = \frac{\Delta}{e\mathcal{E}}. \quad (2.20)$$

Para obtener la dinámica de un paquete de ondas, con la idea de comparar con el resultado semiclásico, es necesario conocer el propagador, en la base de estados de Wannier. En la representación de Wannier, este está dado por

$$\begin{aligned} U_{n,n'}(t) &= \langle n | U(t) | n' \rangle = \sum_l \langle n | \Psi_l \rangle e^{-iE_l t/\hbar} \langle \Psi_l | n' \rangle \\ &= \sum_l J_{n-l}(\gamma) J_{n'-l}(\gamma) \exp(-ile\mathcal{E}at/\hbar), \end{aligned} \quad (2.21)$$

usando el teorema de adición de funciones de Bessel $J_r(z)$ de orden entero,

$$\sum_{r=-\infty}^{r=\infty} J_r(z) J_{r+p}(z) \exp(ir\alpha) = J_p\left(2z \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\right) \exp(ip(\pi - \alpha)/2), \quad (2.22)$$

obtenemos para el propagador la siguiente expresión

$$U_{n,n'}(t) = J_{n-n'}\left(2\gamma \operatorname{sen}\left(\frac{e\mathcal{E}at}{2\hbar}\right)\right) \exp\left(i(n-n')\left(\frac{\pi - e\mathcal{E}at/\hbar}{2}\right) - in'e\mathcal{E}at/\hbar\right). \quad (2.23)$$

El operador de evolución es periódico en el tiempo con el período de Bloch $T_B = 2\pi\hbar/e\mathcal{E}a = 2\pi/\omega_B$. Ahora si podemos estudiar la dinámica del siguiente paquete gaussiano

$$|\Psi(t=0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle, \quad (2.24)$$

con

$$f_n(0) = \left(\frac{a^2}{2\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{n^2 a^2}{4\sigma^2} + ik_0 n d\right) \quad (2.25)$$

donde σ es la varianza de la distribución y k_0 el cuasimomento inicial.

Haciendo la transformada de Fourier de la ecuación de evolución temporal

$$f_n(t) = \sum_{n'} U_{n,n'}(t) f_{n'}(0), \quad (2.26)$$

y utilizando

$$\exp(iz \operatorname{sen} \varphi) = \sum_{r=-\infty}^{r=\infty} \exp(ir\varphi) J_r(z) \quad (2.27)$$

se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{f}(k, t) &= \sum_{n,n'} \exp(-ikna) U_{n,n'}(t) f_{n'}(0) \\ &= \exp\left[i2\gamma \operatorname{sen}\left(\frac{e\mathcal{E}at}{2\hbar}\right) \cos\left(ka + \frac{e\mathcal{E}at}{2\hbar}\right)\right] \\ &\quad \times \sum_{n'} \exp(-i(k + e\mathcal{E}t/\hbar)n'a) f_{n'}(0). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Esta ecuación es aún exacta. Si ahora asumimos que $\sigma/a \gg 1$, de tal manera que la localización espacial del paquete de onda sea débil, entonces la suma sobre n' puede reemplazarse por una integral, y llegamos al siguiente resultado

$$\begin{aligned} \hat{f}(k, t) &\approx \left(\frac{8\pi\sigma^2}{a^2}\right)^{1/4} \exp\left[i2\gamma \operatorname{sen}\left(\frac{e\mathcal{E}at}{2\hbar}\right) \cos\left(ka + \frac{e\mathcal{E}at}{2\hbar}\right)\right] \\ &\quad \times \exp\left(-\sigma^2 \left(k - k_0 + \frac{e\mathcal{E}t}{\hbar}\right)^2\right). \end{aligned} \quad (2.29)$$

En este punto vemos inmediatamente un resultado conocido, comparando con el resultado semiclásico, y este es que el centro del paquete de onda en el espacio k está dado por $k(t) = k_0 - e\mathcal{E}t/\hbar$, como lo estipula el teorema de aceleración.

Veamos ahora que le sucede al paquete de onda a un tiempo t en el espacio real, haciendo la transformada de Fourier inversa

$$f_n(t) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \hat{f}(k, t) \exp(ikna). \quad (2.30)$$

Tomando en cuenta lo que anteriormente habíamos considerado $\sigma/a \gg 1$, obtenemos que esto produce que la distribución $\hat{f}(k, t)$ esté muy localizada alrededor de $k(t)$. Por lo tanto, podemos expandir el factor

$\cos(ka + e\mathcal{E}at/2\hbar)$ en la exponencial de la Ec.(2.29), alrededor de $k(t)$. Para una expansión lineal se encuentra

$$f_n(t) \approx \left(\frac{a^2}{2\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \exp\left(i\left(k_0 - \frac{e\mathcal{E}t}{\hbar}\right)na - i\Phi(t) - \frac{a^2}{4\sigma^2}(n - n(t))^2\right), \quad (2.31)$$

con

$$\Phi(t) = 2\gamma \left[\text{sen}\left(k_0a - \frac{e\mathcal{E}at}{\hbar}\right) - \text{sen}(k_0a) \right] \quad (2.32)$$

y

$$n(t) = \frac{\Delta}{2ea\mathcal{E}} \left[\cos\left(k(0)a - \frac{e\mathcal{E}at}{\hbar}\right) - \cos(k(0)a) \right]. \quad (2.33)$$

En consecuencia, el centro del paquete de onda, $x(t) = n(t)a$, oscila en el espacio con una amplitud que es inversamente proporcional a la fuerza del campo aplicado \mathcal{E} y con un periodo temporal $T_B = 2\pi/\omega_B$, tal como se vio haciendo el análisis semiclásico del mismo problema. El análisis semiclásico es por lo tanto, esencialmente correcto en el caso en que se considera que el paquete de onda inicial esta débilmente localizado $\sigma/a \gg 1$, de tal manera que en el espacio de momento la distribución $\hat{f}(k, t)$ este muy localizada dentro de la zona de Brioullin de ancho $2\pi/a$.

Las oscilaciones de Bloch no pueden verse en cristales comunes, como mencionamos, los electrones en tales cristales sufren colisiones antes de alcanzar el borde de la zona de Brioullin. Sin embargo, recientemente se ha obtenido evidencia experimental de las oscilaciones de Bloch en por ejemplo superredes [70]-[73], átomos ultrafríos en redes ópticas [74]-[82], condensados de Bose Einstein [83]-[85], redes fotónicas [86], etc.

Pasemos ahora a otra de las consecuencias de aplicar un campo eléctrico a un cristal, el tunelaje Zener [56]. El tunelaje Zener se produce cuando un electrón, moviéndose en una red periódica, se acelera por la presencia de un campo eléctrico, de tal manera que adquiere la energía suficiente como para que se de un tunelaje de la banda de valencia a la de conducción. Este proceso se manifiesta más fácilmente en los materiales semiconductores, pues en ellos la energía de la brecha prohibida es del orden de $1eV$.

Tecnológicamente este fenómeno es muy bien aprovechado en los llamados diodos Zener. Estos dispositivos, son juntas semiconductoras dopadas, pegadas de tal forma que para una determinada dirección del campo eléctrico aplicado, la barrera de energía que los electrones tienen que atravesar sea lo más pequeña posible.

El tratamiento teórico de los saltos entre bandas puede modelarse con un Hamiltoniano en la aproximación de amarre fuerte en el que se considera interacción entre bandas. Por ejemplo, en el trabajo de Rotvig, Jauho y Smith [87], se modelan oscilaciones de Bloch en un sistema con dos bandas. Otra de las cosas teóricas relevantes, es saber cual es la probabilidad por unidad de tiempo P para que un electrón pase de la banda de valencia a la de conducción. Clarence Zener en su trabajo de 1934 [56], obtuvo la siguiente expresión para esa probabilidad

$$P = \frac{e\mathcal{E}a}{h} \exp\left[-\frac{\pi^2}{h^2} \frac{ma\Delta^2}{e\mathcal{E}}\right] \quad (2.34)$$

donde a es el parámetro de la red, Δ es el tamaño de la banda prohibida, m es la masa del electrón, h la constante de Planck, e la carga del electrón y \mathcal{E} la magnitud del campo eléctrico. En el caso de tener una constante de red de $a = 3\text{Å}$ y una banda de energía prohibida de $\Delta = 2eV$, la ecuación anterior

proporciona probabilidades apreciables para campos del orden de $10^6 V/cm$, resultado que esta de acuerdo con los datos experimentales [56].

2.2. Electrones sometidos a campos magnéticos constantes

Continuemos con la revisión que estamos haciendo en este capítulo, abordemos ahora el efecto que tienen los campos magnéticos sobre electrones en espacios bidimensionales. En esta sección primero estudiaremos un gas de electrones, esto es, consideraremos que los electrones se mueven en un espacio libre. Este tratamiento nos llevara a determinar que el campo magnético produce una cuantización de los niveles de energía (los llamados niveles de Landau). En la segunda parte de esta sección estudiaremos el problema considerando ahora que los electrones se mueven en una red periódica. Obtendremos entonces que el espectro es un fractal conocido como mariposa de Hofstadter. La conexión entre ambos tratamientos se da considerando en el segundo caso, el potencial de la red periódica muy débil o que los campos magnéticos aplicados son muy intensos, entonces los electrones tenderán a comportarse como electrones de Landau, correspondiendo al caso del gas de electrones [88].

Electrones libres con campo magnético constante

El estudio de electrones libres sometidos a un campo magnético se hace de la siguiente forma. Sabemos que en la aproximación de masa efectiva, los eigenvalores de energía para un electrón con vector de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ restringido a moverse en un plano son

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}. \quad (2.35)$$

Ahora bien, si aplicamos un campo magnético en la dirección z , el electrón quedará descrito por el siguiente hamiltoniano efectivo

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \left[\hat{p}_x^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{e\mathcal{B}}{c}x \right)^2 \right], \quad (2.36)$$

donde hemos reemplazado $\hbar\mathbf{k}$ por el operador $\mathbf{p} - (e\mathbf{A}/c)$ (procedimiento llamado sustitución de Peierls [91]). Tomando \mathbf{A} en la norma de Landau $\mathbf{A} = x\mathcal{B}\hat{y}$. Obtenemos entonces la siguiente ecuación de Schrödinger

$$\frac{1}{2m^*} \left[\hat{p}_x^2 + \left(\hat{p}_y + \frac{e\mathcal{B}}{c}x \right)^2 \right] \Psi(x, y) = E\Psi(x, y). \quad (2.37)$$

Debido a la simetría de translación en la dirección y podemos intentar una solución del tipo

$$\Psi_k(x, y) = e^{iky} f_k(x), \quad (2.38)$$

que da como resultado la siguiente ecuación

$$\left[\frac{1}{2m^*} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2m^*} \left(\hbar k + \frac{e\mathcal{B}}{c}x \right)^2 \right] f_k(x) = E_k f_k(x). \quad (2.39)$$

Esta es simplemente la ecuación de un oscilador armónico unidimensional

$$\left[\frac{1}{2m^*} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 (x + kl_B^2)^2 \right] f_k(x) = E_k f_k(x), \quad (2.40)$$

cuya frecuencia ω_c es la frecuencia clásica de ciclotrón

$$\omega_c = \frac{e\mathcal{B}}{m^*c} \quad (2.41)$$

y donde

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{e\mathcal{B}}} \quad (2.42)$$

es la llamada longitud magnética.

Para cada onda plana escogida en la dirección de y , habrá un conjunto de eigenvalores de energía

$$E_{kn} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.43)$$

Estos niveles de energía son llamados niveles de Landau. Las correspondientes eigenfunciones son

$$\Psi_{nk}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{iky} H_n(x - kl_B^2) e^{-\frac{1}{2l_B^2}(x - kl_B^2)^2}, \quad (2.44)$$

donde H_n es el n -ésimo polinomio de Hermite [46] y \sqrt{L} es un factor de normalización.

Físicamente, lo que sucede al electrón cuando un campo magnético es aplicado, es que este es forzado a adoptar órbitas de ciclotrón cuya frecuencia es ω_c .

Los niveles de Landau son altamente degenerados y uno solo de ellos puede contener un gran número de electrones. En una muestra típica, el número de estados n_e en cada nivel de Landau es igual al número de fluxones magnéticos $\phi_0 = h/e$ que atraviesan la superficie S de la muestra [89]

$$n_e = \frac{S\mathcal{B}}{\phi_0} \quad (2.45)$$

Un nivel de Landau está lleno cuando cada uno de sus estados degenerados se encuentra ocupado por un electrón. El número de niveles de Landau que se encuentran llenos se llama factor de llenado ν_L y es un número racional. Si \mathcal{N} es número total de electrones, el factor de llenado esta dado por

$$\nu_L = \frac{\mathcal{N}}{n_e} = n_0 \frac{\phi_0}{\mathcal{B}}, \quad (2.46)$$

donde n_0 es la densidad superficial de electrones.

Para estudiar el efecto Hall, ya sea clásico o cuántico, se usa la configuración experimental que se muestra en la Fig.(2.1). Una película de un material conductor o semiconductor lleva una corriente I_L debido a la aplicación de un campo eléctrico \mathbf{E} que establece una caída de potencial V_L a lo largo de la muestra. La aplicación de un campo magnético \mathbf{B} perpendicular a la muestra produce una fuerza de Lorentz que desvía a los electrones y huecos lateralmente dando lugar a la acumulación de cargas de signos opuestos en la dirección transversal. El gradiente de densidad de carga, a su vez, genera un campo eléctrico que contrarresta a la fuerza de Lorentz. Así se establece una diferencia de potencial V_H llamado potencial de Hall.

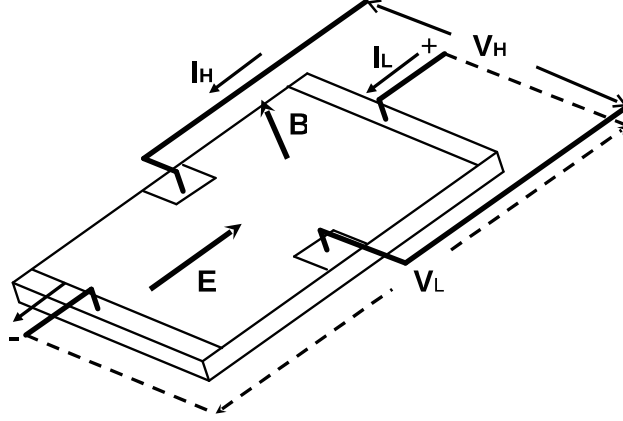


Figura 2.1: Configuración experimental para medir el efecto Hall.

El efecto Hall clásico puede entenderse en términos de estas consideraciones. La resistencia de Hall clásica R_H , definida como el cociente de la diferencia de potencial de Hall y la corriente depende linealmente del campo magnético

$$R_H = \frac{V_H}{I_L} = \frac{\mathcal{B}}{n_0 e}, \quad (2.47)$$

donde e es la carga del electrón.

El efecto Hall cuántico [57], mientras tanto, puede entenderse combinando las Ecs. (2.46) y (2.47) pues se obtiene para la resistencia de Hall

$$R_H = \frac{1}{\nu_L} \frac{h}{e^2}, \quad (2.48)$$

lo cual muestra que la densidad de electrones y el campo magnético pueden ajustarse de tal manera que ν_L sea entero. Es importante aclarar lo siguiente: aun cuando los niveles de Landau también aparezcan en un sistema tridimensional, el efecto Hall cuántico solo puede verse con sistemas bidimensionales, esto es debido a que en un sistema tridimensional la continuidad en los estados de energía en la tercera variable, en nuestro caso la variable z , hace que no sea posible ver los estados discretos producidos por los niveles de Landau. Por otra parte, cuando se aplican campos magnéticos más intensos, se producen interacciones entre electrones, lo que da lugar a ν_L fraccionarios, a este fenómeno se le llama efecto Hall fraccionario y fue descubierto por Störmer, Tsui y Gossard [58].

Las primeras mediciones del efecto Hall cuántico realizadas por von Klitzing, Dorda y Pepper [57] se llevaron a cabo usando un transistor de efecto de campo MOSFET de Si/SiO_2 con campos magnéticos que iban de los 3 a los 10T . Los parámetros que caracterizan a la red de Si permitieron considerar

a los electrones en el transistor como electrones de Landau perturbados por un potencial de red muy débil [88] y por lo tanto la teoría expuesta es adecuada para la descripción de estos electrones. En los experimentos de Störmer, Tsui y Gossard [58], para el estudio del efecto Hall cuántico fraccionario, se usaron heterojunturas de *GaAs/AlGaAs* con campos magnéticos en el intervalo de los 3 a los 25T. En este caso la condición de tener electrones de Landau en un potencial de red débil es mejorada sustancialmente.

Veamos ahora lo que sucede a los electrones cuando además de sentir el efecto de un campo magnético sienten el efecto de moverse en el potencial de una red cristalina.

2.2.1. Electrones en una red periódica con campo magnético constante

El análisis del problema de un electrón en una red periódica al que se le aplica un campo magnético constante se puede hacer a través de la ecuación de Harper [59], [90]. Harper abordó este problema usando la aproximación de amarre fuerte y de Peierls [91]. En la aproximación de amarre fuerte la energía de un electrón con vector de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ para una red cuadrada, esta dada por

$$E(\mathbf{k}) = 2U_0(\cos k_x a + \lambda \cos k_y a), \quad (2.49)$$

donde a es el parámetro de la red, U_0 es el parámetro de salto de un sitio de la red a otro contiguo a lo largo del eje x y $U_0\lambda$ es el parámetro de salto a lo largo del eje y . El efecto del campo magnético se introduce a través del llamado acoplamiento mínimo (también llamado sustitución de Peierls), el cual consiste en reemplazar el momento $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ por el operador $\mathbf{p} - (e\mathbf{A}/c)$ donde \mathbf{A} es el potencial vectorial que satisface,

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (2.50)$$

En la norma de Landau, para un campo magnético perpendicular al plano x - y , el potencial vectorial toma la forma $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$. Con esta elección se obtiene la siguiente ecuación de Schrödinger

$$E(\mathbf{p})\Psi(x, y) = 2U_0 \left[\cos p_x a + \lambda \cos \left(p_y a + \frac{eBax}{\hbar c} \right) \right] \Psi(x, y). \quad (2.51)$$

Dado que $\exp(-iap_x)$ y $\exp(-iap_y)$ son los operadores de translación a lo largo del eje x y y en unidades de a , la ecuación de Schrödinger se transforma en

$$E(\mathbf{p})\Psi(x, y) = 2U_0 \left[\Psi(x + a, y) + \Psi(x - a, y) + \lambda e^{ieBax/\hbar c} \Psi(x, y + a) + \lambda e^{-ieBax/\hbar c} \Psi(x, y - a) \right] \quad (2.52)$$

la cual es una ecuación discreta que acopla a la función de onda con las amplitudes de los cuatro sitios cercanos. Es razonable asumir que el comportamiento en la dirección de y será del tipo de una onda plana, puesto que las fases en la ecuación anterior solo involucran la variable x . Tomemos entonces una solución del tipo

$$\Psi(na, ma) = e^{i\nu m} \Psi(n). \quad (2.53)$$

Definiendo $\varepsilon = E/U_0$ y

$$\phi = \frac{a^2 B}{2\pi(\hbar c/e)} \quad (2.54)$$

que corresponde a la razón entre el flujo magnético que pasa en una celda respecto del flujo cuántico, obtenemos finalmente la ecuación de Harper para $\Psi_n \equiv \Psi(n)$

$$\varepsilon\Psi_n = \Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} + 2\lambda \cos(2\pi\phi n - \nu)\Psi_n. \quad (2.55)$$

La ecuación anterior también describe a un electrón que se mueve a lo largo de una cadena lineal en un potencial $\cos(2\pi\phi n - \nu)$ (también llamado potencial de Harper). La cantidad ϕ especifica el cociente entre el período del potencial y el período correspondiente al acoplamiento a primeros vecinos.

Al revisar este tema surgió el problema de describir a un electrón moviéndose en una cadena lineal con un potencial cuadrado, el cual incluimos por completez en la siguiente sección de este capítulo. El problema mencionado se obtiene naturalmente a partir de considerar que cualquier potencial cuadrado se puede escribir como una suma de potenciales de Harper. En particular en la siguiente sección, se estudia el potencial de Fibonacci que cumple con la característica de ser un potencial cuadrado y en consecuencia puede aplicarse el tratamiento descrito. Este problema, es de particular interés porque es el modelo más simple de un cuasicristal [92]. Pero, antes de pasar a este asunto permitámonos presentar una manera para encontrar el espectro de energías de la ecuación de Harper, método que también empleamos para encontrar el espectro de energías en el caso de tener un potencial de Fibonacci.

Matriz de transferencia

Los eigenvalores de energía del problema de Harper pueden obtenerse mediante el método de la matriz de transferencia. Este método consiste en escribir la ecuación de Harper (2.55) de la siguiente manera

$$\Psi_n = \begin{pmatrix} \varepsilon - 2\lambda \cos(2\pi\phi n - \nu) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Psi_{n-1}, \quad (2.56)$$

donde Ψ_n es un vector con componentes,

$$\Psi_n = \begin{pmatrix} \Psi_n \\ \Psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (2.57)$$

y M_n es la matriz de transferencia

$$M_n = \begin{pmatrix} \varepsilon - 2\lambda \cos(2\pi\phi n - \nu) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.58)$$

que conecta Ψ_{n-1} con Ψ_n . La matriz de transferencia puede conectar a dos coeficientes cualesquiera si es multiplicada sucesivamente

$$\Psi_{n+m} = M_{n+m-1}M_{n+m-2}\dots M_{n+1}M_n\Psi_n. \quad (2.59)$$

Ahora bien debe imponerse una condición física sobre las Ψ y esta es que deben de ser acotadas para toda n . Esta condición se translada al producto de matrices de transferencia de la siguiente manera. Supongamos por el momento que ϕ es irracional que es el caso más general. Luego entonces es posible probar que los eigenvalores de la matriz $Q(\varepsilon, \phi, \nu)$ del producto de q matrices sucesivas M

$$Q(\varepsilon, \phi, \nu) = M_{n+q-1}M_{n+q-2}\dots M_{n+1}M_n, \quad (2.60)$$

deben de tener modulo unitario [59]. Esta condición es equivalente a requerir que el valor absoluto de la traza de la matriz sea menor o igual a 2

$$|TrQ(\varepsilon, \phi, \nu)| \leq 2. \quad (2.61)$$

En el caso de que la matriz de transferencia tenga una periodicidad determinada como, por ejemplo,

$$M_{n+q} = M_n \quad (2.62)$$

el producto de matrices consistirá en una repetición de bloques de tamaño q . La traza de la matriz total de transferencia $Q(\varepsilon, \phi, \nu)$ será un polinomio de grado q en la energía. Por lo tanto, el espectro se separará en q bandas. Es importante agregar un comentario adicional sobre ϕ en caso de cumplirse la Ec.(2.62). En tal caso ϕ debe de satisfacer la relación

$$2\pi(n+q)\phi - \nu = 2\pi\phi n - \nu + 2\pi p \quad (2.63)$$

para algún entero p . Esta condición equivale a pedir que ϕ sea de la forma

$$\phi = p/q, \quad (2.64)$$

es decir, ϕ debe de ser un número racional para que el sistema presente periodicidad.

Se puede mostrar que la única manera en la que interviene el valor de ν en la traza de Q es en forma aditiva. Esto quiere decir que si ν cambia, la forma de la gráfica de la traza de Q contra ε permanece igual. Lo único que pasa es que esta gráfica se mueve completa hacia arriba o hacia abajo como se puede ver de la siguiente expresión

$$|TrQ(\varepsilon, \phi, \nu)| = |TrQ(\varepsilon, \phi, 0)| + 2g(\nu), \quad (2.65)$$

donde g es una función compleja y periódica de amplitud 1[59]. Puesto que $2g(\nu)$ varia entre 2 y -2 , la condición sobre la traza puede reescribirse como

$$|TrQ(\varepsilon, \phi, 0)| \leq 4. \quad (2.66)$$

Usando este criterio podemos encontrar los eigenvalores de energía de un electrón en una red periódica sujeto a un campo magnético constante perpendicular a la red. El espectro obtenido presenta una estructura fractal y se le conoce como mariposa de Hofstadter, Fig.(2.2). Para el grafeno se obtiene una estructura fractal parecida como se puede notar en la Fig.(2.3) El primer investigador en obtener este espectro fue R. Rammal en 1985 [60].

El espectro de la mariposa de Hofstadter para una red cuadrada ha sido observado experimentalmente en arreglos de dispersores resonantes dentro de guías de microondas [93] y ondas acústicas [94]. Las ecuaciones que describen a tales sistemas son similares a la de Harper.

Sin embargo, no resulta fácil observar el espectro de la mariposa en sistemas bidimensionales de electrones. Para ello se requieren valores de ϕ del orden de la unidad, pero aún con los campos magnéticos más intensos que se producen en el laboratorio, esto resulta complicado debido a los diminutos parámetros de red que poseen los cristales naturales.

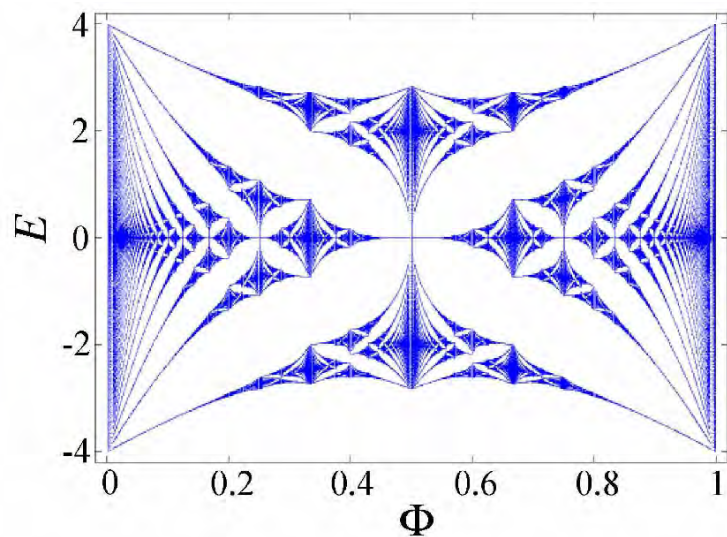


Figura 2.2: Espectro de energías para el problema de un electrón de Bloch sujeto a un campo magnético constante.

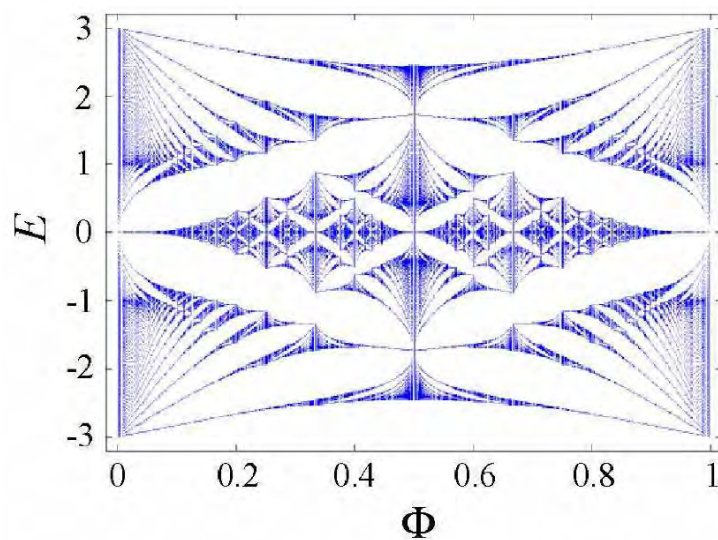


Figura 2.3: Espectro de energías para el problema de grafeno sometido a un campo magnético constante.

2.3. La cadena de Fibonacci

Hagamos una pequeña pausa en la revisión que estamos haciendo para incorporar la discusión del problema de un electrón que se mueve en una cadena lineal con un potencial cuadrado. Como señalamos en la sección anterior, esta investigación surgió como un problema importante al estar llevando a cabo esta revisión y se puede analizar como una superposición de potenciales de Harper. En esta sección estudiamos la cadena de Fibonacci que como veremos, es un caso particular de un potencial cuadrado. La importancia de la cadena radica en que con este modelo es posible estudiar la naturaleza de las propiedades físicas de los cuasicristales, tema que no está muy bien entendido[95],[92]. La cadena de Fibonacci es el modelo más simple de un cuasicristal [92]. La discusión que aparece en este capítulo, resultado del presente trabajo de investigación fue publicada en la revista Physica B [96].

El modelo de una cadena de Fibonacci puede construirse de la siguiente manera, tomemos un hamiltoniano en la aproximación de amarre fuerte del tipo

$$(E - V(n)) \Psi_n = t_n \Psi_{n+1} + t_{n-1} \Psi_{n-1}, \quad (2.67)$$

donde Ψ_n es la función de onda en el sitio n , t_n es la integral de salto entre los sitios n y $n + 1$. En este caso tomamos $t_n = 1$ para todos los sitios. $V(n)$ es el potencial en el sitio n , y E son las energías permitidas.

La cadena de Fibonacci o potencial de Fibonacci en el modelo diagonal, que es el que nosotros usaremos, se obtiene cuando $V(n)$ toma dos distintos valores que denotamos como V_A y V_B siguiendo una secuencia de Fibonacci. Existen otras elecciones para construir el modelo de un potencial de Fibonacci como, por ejemplo, poner $V(n)$ como una constante y usar la secuencia de Fibonacci en las integrales de transferencia t_n . Tal problema es conocido como el modelo no diagonal. El modelo mezclado se obtiene cuando se usa la frecuencia de Fibonacci en ambos $V(n)$ y t_n [98].

La secuencia de Fibonacci se construye como sigue: considere dos letras A y B y las reglas de sustitución $A \rightarrow B$, y $B \rightarrow AB$. Si uno define la primera generación de la secuencia como $\mathcal{F}_1 = A$ y la segunda como $\mathcal{F}_2 = B$, las subsiguientes cadenas se generaran usando las dos reglas dadas, por ejemplo, $\mathcal{F}_3 = AB$. Comenzando con A , se pueden construir las siguientes secuencias, $A, B, AB, BAB, ABBAB, BABABBAB, \dots$ Cada generación obtenida por iteración de las reglas puede etiquetarse con un índice l . El número de letras en cada generación l está dado por los números de Fibonacci $F(l)$ que satisfacen la relación $F(l) = F(l-1) + F(l-2)$ con las condiciones iniciales $F(0) = 1$ y $F(1) = 1$.

Una expresión analítica para escribir el potencial de Fibonacci puede obtenerse usando el método de corte y proyección. Con tal método es muy sencillo probar que la posición y_n del n -ésimo átomo en una cadena determina por la secuencia de Fibonacci esta dada por [99]

$$y_n = [n\phi],$$

donde la función $[x]$ denota el entero más grande menor que x , ϕ es un parámetro que resulta ser la tangente del ángulo entre el espacio real y una red periódica de mayor dimensión [99]. Esta posición y_n resulta fundamental para poder escribir el potencial como se vera un poco más adelante. Para obtener la secuencia de Fibonacci, ϕ debe de ser igual al inverso del número áureo $\tau^{-1} = (\sqrt{5} - 1)/2$. Para otros valores de ϕ , se obtienen estructuras que tienen diferentes tipos de cuasiperiodicidad. Como un ejemplo si $\phi = 1$, la secuencia resultante es $AAAAA\dots$, para $\phi = 1/2$ se tiene $ABABABAB\dots$ y para $\phi = 2/3$, $AABAABAABA\dots$. Un caso relevante se obtiene cuando $\phi = \mathcal{F}(l)/\mathcal{F}(l+1)$ pues estos números son las aproximaciones racionales del número áureo.

El siguiente paso para escribir el potencial consiste en la observación de que la separación entre átomos en la cadena es $y_{n+1} - y_n$. Es sencillo mostrar que la separación toma solo dos valores l_A y l_B . Entonces podemos escribir el potencial como

$$V(n) = V_B + V_A (\lfloor (n+1)\phi \rfloor - \lfloor n\phi \rfloor). \quad (2.68)$$

Comprobemos que esta expresión nos da el potencial cuadrado cuasiperiódico que queremos. Tomemos, por ejemplo, el caso en que $\phi = 1/2$, como mencionamos en el párrafo anterior en ese caso la secuencia es $ABABAB\dots$. Con los valores dados para el potencial en la Ec.(2.68) V_A y V_B , la secuencia que obtendremos será $V_A + V_B, V_B, V_A + V_B, V_B, V_A + V_B, \dots$. Comencemos con el intervalo $1 \leq n < 2$, en tal caso solo es necesario poner $n = 1$ en la Ec.(2.68) para obtener la altura que corresponde a todo ese espacio, obtenemos

$$V(1) = V_B + V_A (\lfloor (2)/2 \rfloor - \lfloor 1/2 \rfloor) = V_B + V_A(1 - 0) = V_B + V_A. \quad (2.69)$$

Para el intervalo de $2 \leq n < 3$, ponemos $n = 2$ en la expresión (2.68), se sigue entonces que la altura del potencial será

$$V(2) = V_B + V_A (\lfloor (3)/2 \rfloor - \lfloor 2/2 \rfloor) = V_B + V_A(1 - 1) = V_B. \quad (2.70)$$

Continuando con el procedimiento en los siguientes intervalos obtendremos

$$V(1) = V_B + V_A (\lfloor (4)/2 \rfloor - \lfloor 3/2 \rfloor) = V_B + V_A(2 - 1) = V_B + V_A, \quad \text{para } 3 \leq n < 4,$$

$$V(1) = V_B + V_A (\lfloor (5)/2 \rfloor - \lfloor 4/2 \rfloor) = V_B + V_A(2 - 2) = V_B, \quad \text{para } 4 \leq n < 5, \quad (2.71)$$

⋮
⋮
⋮

Vemos que efectivamente obtenemos el potencial cuadrado con la secuencia que queríamos. Un punto importante que se debe señalar es que con otro valor de ϕ , por ejemplo, con $\phi = 2/3$, obtendremos una secuencia que ira de la siguiente manera $V_A + V_B, V_A + V_B, V_B, V_A + V_B, V_A + V_B, V_B, \dots$. Es decir, este potencial tendrá el valor $V_A + V_B$ en un intervalo cuyo ancho es de 2 números enteros y un valor V_B un intervalo cuyo ancho es de un número entero. Después de describir como funciona la expresión de la Ec.(2.68), volvamos a nuestro problema. Usando la identidad $x = \lfloor x \rfloor + \{x\}$, donde $\{x\}$ es la parte decimal de x , obtenemos que $V(n)$ puede reescribirse de la siguiente forma

$$V(n) = \langle V \rangle + \delta V (\{n\phi\} - \{(n+1)\phi\}), \quad (2.72)$$

donde $\langle V \rangle = V_A\phi + V_B(1 - \phi)$ es el promedio del potencial que cambia el cero de las energías, y δV es la fuerza de la cuasiperiodicidad, medida por la diferencia entre las energías de los sitios y definida como $\delta V \equiv V_A - V_B$. En lo que sigue sin pérdida de generalidad, ponemos V_A y V_B de tal manera que $\langle V \rangle = 0$.

La función parte decimal $\{x\}$ tiene periodo 1, y puede desarrollarse como una serie de Fourier

$$\{x\phi\} = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s} \text{sen}(2\pi\phi s x), \quad (2.73)$$

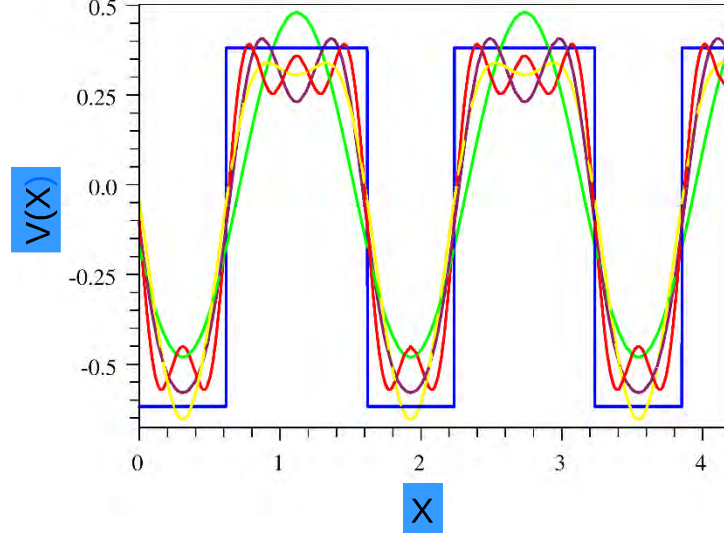


Figura 2.4: Potencial cuadrado más general que puede obtenerse con la Ec.(2.68) El potencial de Fibonacci puede obtenerse a partir de este potencial cuadrado cuando $\phi = \tau^{-1}$. La aproximación con uno, dos y tres armónicos, obtenida por la Ec.(2.74), se muestra en la figura.

se sigue entonces

$$V(n) = \bar{V} + 2\delta V \sum_{s=1}^{\infty} \tilde{V}(s) \cos(\pi s \phi (2n + 1)), \quad (2.74)$$

donde $\tilde{V}(s)$ es el armónico s de la serie de Fourier,

$$\tilde{V}(s) = \frac{\text{sen}(\pi s \phi)}{\pi s}. \quad (2.75)$$

Los primeros términos de la serie se muestran en la Fig.(2.4), vemos que se está aproximando un potencial cuadrado como una suma de cosenos. En la Fig.(2.4) se observa la lenta convergencia de la serie debido al factor $1/s$ de cada armónico. Este potencial puede simplificarse más si escogemos una fase apropiada χ en la Ec.(2.72), esto lo hacemos reemplazando el término $\{x\phi\}$ por $\{x\phi + \chi\}$. La fase χ es solamente una traslación horizontal del potencial. Para $\chi = -\phi/2$, el potencial de Fibonacci se puede escribir como,

$$V(n) = 2\delta V \sum_{s=1}^{\infty} \tilde{V}(s) \cos(2\pi s \phi n). \quad (2.76)$$

Observamos que el potencial de Fibonacci es una superposición de potenciales de Harper cuya forma es

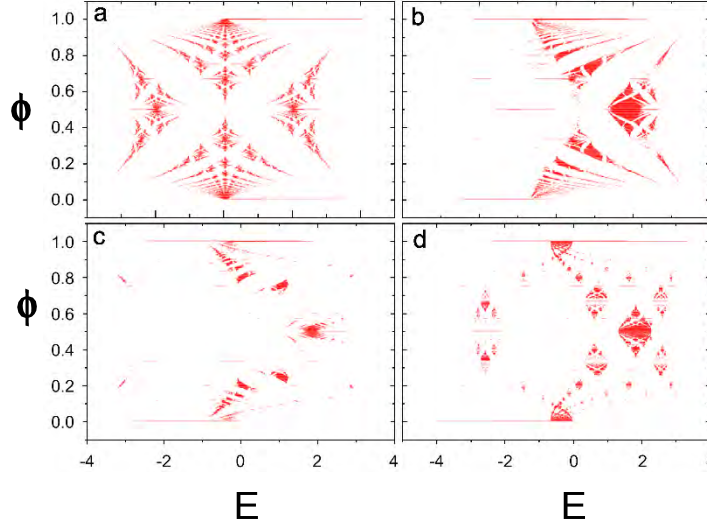


Figura 2.5: Espectro de energías como función del parámetro ϕ , usando (a) uno armónico, (b) dos armónicos, (c) tres armónicos y (d) el potencial cuadrado, que contiene el potencial de Fibonacci en el caso de $\phi = \tau^{-1}$.

$$V_H(n) = 2\lambda \cos(2\pi\phi n - \nu). \quad (2.77)$$

En la Fig.(2.5) se muestra el espectro de energías obtenido por el método de la matriz de transferencia como función de ϕ para el caso en que $\delta V = \pi/sen(\pi\tau^{-1}) \approx 3,3706$, lo que corresponde a $\lambda = 1$ en la Ec.(2.55). El espectro conocido como mariposa de Hofstadter se obtiene al dibujar el primer armónico $s = 1$ de la Ec.(2.76) como se muestra en la Fig.(2.5 a). En las Figs. (2.5 b) y (2.5 c) se muestran el efecto de añadir los armónicos $s = 2$ y $s = 3$. La Fig.(2.5 d) presenta el espectro para el potencial de Fibonacci completo que se obtiene sumando todos los armónicos. Existe un cambio importante entre el caso en que se tiene solo el primer armónico (potencial de Harper puro) y el caso en que se añade el segundo armónico. Esto es que la parte izquierda del espectro desaparece. Es también claro que con tres armónicos la estructura del espectro es muy similar a la del potencial de Fibonacci completo. La desaparición de la parte izquierda del espectro en las figuras tiene sus orígenes en la diferencia de longitudes de los escalones del potencial de Fibonacci. Para el primer armónico este cambio no se observa pero, si observamos la Fig.(2.4) podemos ver que con dos armónicos existe una asimetría en los escalones.

2.4. Electrones sometidos a campos magnéticos constantes y radiación.

Volvamos ahora a la revisión que estamos llevando a cabo. Como última parte de este repaso describamos el problema de electrones sometidos simultaneamente a campos magnéticos constantes y a radiación electromagnética. Estudios experimentales de principios del siglo veintiuno, mostraron que electrones sometidos a estas condiciones experimentales producían estados de resistencia cero [62]-[65]. Estudios teóricos posteriores corroboraron este hecho [66]. En esta sección expondremos a grandes rasgos como se realizó el estudio teórico para describir este fenómeno. El trabajo fue realizado por Alejandro Kunold B. y Manuel Torres L. en el año de 2005 [66]. En la investigación referida, primero se comienza por plantear que la dinámica de los electrones bidimensionales sujetos a un campo magnético perpendicular y a radiación electromagnética está descrita por la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi = \left[H_{B,\omega} + \tilde{V}(r) \right] \Psi, \quad (2.78)$$

donde $H_{B,\omega}$ es el hamiltoniano que contiene la interacción con el campo magnético y la radiación electromagnética y $\tilde{V}(r)$ es cualquier potencial que pueda ser descompuesto en una serie de Fourier como, por ejemplo, potenciales periódicos o impurezas en la red.

El Hamiltoniano $H_{B,\omega}$ está dado por

$$H_{B,\omega} = \left(\frac{1}{2m^*} \right) \boldsymbol{\pi}^2, \quad \boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}, \quad (2.79)$$

donde m^* es la masa efectiva del electrón y el potencial vectorial \mathbf{A} en el límite de onda larga ($\lambda \rightarrow \infty$) puede escribirse como

$$\mathbf{A} = - \left(\frac{1}{2} \right) \mathbf{r} \times \mathbf{B} + \text{Re} \left[\left(\frac{\mathbf{E}_0}{\omega} \right) \exp(i\omega t) \right]. \quad (2.80)$$

El problema de los electrones bidimensionales sujetos a un campo magnético constante y a radiación se resuelve de una manera exacta y se considera $\tilde{V}(r)$ como una perturbación.

El sistema descrito por el hamiltoniano $H_{B,\omega}$ puede considerarse como un oscilador armónico forzado, tal problema ya había sido resuelto por Husimi [100], [101]. En el trabajo que estamos describiendo se hace uso de esta técnica. El procedimiento consiste en encontrar una transformación unitaria $W(t)$ que nos lleve la ecuación de Schrödinger con el hamiltoniano $H_{B,\omega}$ a una ecuación donde se tenga un Hamiltoniano de oscilador armónico simple

$$P_0 \Psi = \omega_c \left(\frac{Q_1^2 + P_1^2}{2} \right) \Psi, \quad (2.81)$$

aquí $\omega_c = eB/m^*$ es la frecuencia de ciclotrón. La transformación $W(t)$ para lograr ese objetivo viene dada por

$$W(t) = \exp\{i\eta_1 Q_1\} \exp\{i\xi_1 P_1\} \exp\{i\eta_2 Q_2\} \\ \times \exp\{i\xi_2 P_2\} \exp \left\{ -i \int^t dt \mathcal{L} \right\}, \quad (2.82)$$

donde las funciones η_i y ξ_i son las soluciones de las ecuaciones clásicas de movimiento que resultan de la variación del Lagrangiano

$$\mathcal{L} = \left(\frac{\omega_c}{2}\right) (\eta_1^2 + \xi_1^2) + (\xi_1' \eta_1 + \xi_2' \eta_2) + e l_B [E_x(\xi_1 + \eta_2) + E_y(\eta_1 + \xi_2)]. \quad (2.83)$$

Al ser este problema de un oscilador armónico simple, las eigenfunciones son fáciles de encontrar, en la representación (P_1, P_2) se escriben como

$$\Psi_{\mu,k}(P) = \langle P | \mu, k \rangle = \exp\{-i \text{sen}(2\omega t) F(\omega)\} \Phi_\mu(P_1) \delta(P_2 - k), \quad (2.84)$$

donde

$$\Phi_\mu(P_1) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} 2^\mu \mu!}} \right) e^{-P_1^2/2} H_\mu(P_1) \quad (2.85)$$

y $F(\omega)$ está dada por

$$F(\omega) = \frac{\omega}{\omega_c} \left(\frac{e E_0 l_B}{\omega^2 - \omega_c^2} \right)^2 \left[\omega^2 - \omega_c^2 + 2\omega^2 \varepsilon_x^2 - 2\omega_c^2 \varepsilon_y^2 + \frac{\text{Re}(\varepsilon_x^* \varepsilon_y)}{\omega \omega_c} (2\omega^4 - \omega^2 \omega_c^2 + \omega_c^4) \right]. \quad (2.86)$$

Incluyamos ahora el potencial $\tilde{V}(r)$, si la transformación $W(t)$ se aplica a la ecuación de Schrödinger Ec.(2.78), resulta en lo siguiente

$$P_0 \Psi^{(W)} = H_0 \Psi^{(W)} + V_W(t) \Psi^{(W)}, \quad (2.87)$$

con $\Psi^{(W)} = W(t) \Psi$ y

$$V_W(t) = W(t) \tilde{V}(r) W^{-1}(t). \quad (2.88)$$

Resolviendo ahora en la representación de interacción donde $\Psi_I^{(W)} = \exp\{i H_0 t\} \Psi^{(W)}$, la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$i \partial_t \Psi_I^{(W)} = \{V_W(t)\}_I \Psi_I^{(W)}. \quad (2.89)$$

Encontramos que la evolución temporal de la función de onda viene dada por $\Psi_I^{(W)}(t) = U(t - t_0) \Psi_I^{(W)}(t_0)$. Donde el operador de evolución $U(t - t_0)$ a primer orden en teoría de perturbaciones es

$$U(t) = 1 - i \int_{-\infty}^t dt' [W^\dagger(t') \tilde{V}(r) W(t')]_I. \quad (2.90)$$

Para evaluar este operador es necesario saber que tipo de potencial $\tilde{V}(r)$ se propone, en la investigación planteada se propone un potencial de impurezas que se puede expandir como una serie de Fourier.

Hemos obtenido la solución a la ecuación original de Schrödinger Ec.(2.78) a través de tres transformaciones sucesivas, la expresión de esta solución esta dada por

$$|\Psi_{\mu,k}(t)\rangle = W^\dagger \exp\{-i H_0 t\} U(t - t_0) |\mu, k\rangle. \quad (2.91)$$

Con la solución determinada es fácil calcular cualquier tipo de propiedad física del sistema, en el caso del trabajo que estamos describiendo se quiere estudiar la resistividad de una muestra de GaAs/Al_xGa_{1-x}As

para mostrar que existen estados de resistecia cero. Teniendo ese objetivo en mente con la solución obtenida Ec.(2.91) se evalua la matriz de densidad cuando a la muestra de GaAs/Al_xGa_{1-x}As se le aplica un campo eléctrico externo de la forma

$$\mathbf{E}_{ext} = \mathbf{E}_{dc} \cos \Omega t \exp(-\eta |t|), \quad (2.92)$$

La corrección de lo elementos de la matriz de densidad a primer orden es

$$\begin{aligned} \langle \mu | \tilde{\Delta} \rho(t) | \nu \rangle &= \langle \Psi_\mu | \Delta \rho(t) | \Psi_\nu \rangle \\ &= \frac{eE_{dc}}{2} \int_{-\infty}^t \left[\frac{e^{i(\Omega-i\eta)}}{\Omega} f_{\mu\nu} \langle \Psi_\mu | \boldsymbol{\pi} | \Psi_\nu \rangle + (\Omega \rightarrow -\Omega) \right], \end{aligned} \quad (2.93)$$

donde se definió

$$f_{\mu\nu} = f(\varepsilon_\mu) - f(\varepsilon_\nu), \quad (2.94)$$

siendo $f(\varepsilon_\mu)$ la distribución de Fermi usual.

Armados con estos resultados es posible evaluar la densidad local de corriente a primer orden usando $\langle J(t, r) \rangle = Tr[\tilde{\Delta} \rho(t) \tilde{J}(t)]$. Para obtener lo que se puede medir en un experimento es necesario realizar el siguiente promedio

$$\mathbf{j} = (\tau_\omega V)^{-1} \int_0^{\tau_\omega} dt \int d^2x \langle J(t, r) \rangle. \quad (2.95)$$

Se sigue entonces que la conductividad $\sigma = \mathbf{j}/E$ puede calcularse explícitamente. De aquí es sencillo computar la resistividad puesto que se cuenta con la relaciones [88]

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2)} \quad (2.96)$$

y

$$\rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2)}. \quad (2.97)$$

Los resultados obtenidos reflejan un comportamiento oscilatorio de la resistividad ρ_{xx} con estados de resistencia negativa. Se encontró que ρ_{xx} se hace cero cuando $\epsilon = \omega/\omega_c = j$ para j enteros. Además siguen un patrón con mínimos en $\epsilon = j + \delta$ y máximos en $\epsilon = j - \delta$, con $\delta \approx 1/5$ Fig.(2.6).

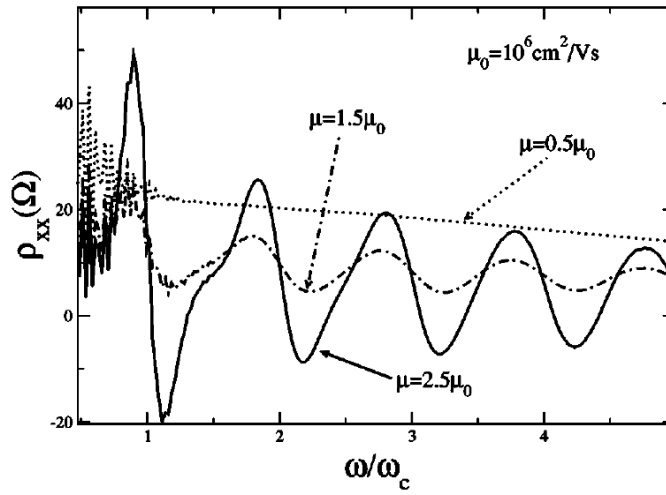


Figura 2.6: Resistividad longitudinal como función de $\epsilon = \omega/\omega_c$ para tres de la movilidad de los electrones $\mu = 0.5 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ (línea de puntos), $\mu = 1.5 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ (línea de puntos y rayas) y $\mu = 2.5 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ (línea continua). En los dos últimos casos las oscilaciones siguen un patrón con mínimos en $\epsilon = j + \delta$ y máximos en $\epsilon = j - \delta$, con $\delta \approx 1/5$. Los estados con resistividad cero aparecen únicamente cuando $\mu > 1.5 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Figura tomada de [66].

Capítulo 3

Grafeno sometido a radiación

En el capítulo anterior estudiamos lo que sucede a los electrones moviéndose en una red periódica sujetos a campos eléctricos y magnéticos. Vimos entre otras cosas, que es posible obtener las funciones de onda y los espectros de energía para todos los casos planteados. Por ejemplo, cuando los electrones se mueven en espacios bidimensionales sujetos a campos magnéticos constantes, encontramos que las funciones de onda se componen de dos partes: una de ellas, una onda plana en la dirección y y la otra, la solución del problema de un oscilador armónico en una dimensión. Los niveles de energía en consecuencia quedaron determinados por una secuencia de escalones, llamados niveles de Landau.

Tener los espectros de energía y las funciones de onda en forma explícita da una gran ventaja teórica, pues permite calcular propiedades físicas como la resistividad, transparencia, conductividad, etc. El último tema de la revisión del capítulo anterior da un ejemplo claro de ello. En ese caso, a partir de las funciones de onda encontradas, se calculó la resistividad de una muestra de $GaAs/Al_xGa_{1-x}$ a la que se le aplicó simultáneamente radiación y un campo magnético constante.

En este capítulo comenzaremos con el análisis del problema de grafeno sometido a radiación electromagnética. Describiremos el problema que vamos a analizar y el modelo que vamos a utilizar. A partir del modelo planteado, obtendremos la ecuación más general que describirá nuestro problema. Intentaremos entonces, encontrar una solución explícita (función de onda) para esta ecuación y discutiremos el espectro de energías que se desprende de ella.

3.1. Planteamiento del problema y modelo.

Iniciemos determinando cual va a ser nuestro problema de estudio y el modelo que vamos a usar para analizarlo. Consideremos un electrón en la red grafeno sujeto a una onda electromagnética plana como se muestra en la Fig.(3.1). La onda electromagnética se propaga perpendicular al plano del grafeno. En el caso de grafeno se ha probado que el Hamiltoniano de Dirac para una partícula, puede ser usado como una buena aproximación para describir la dinámica de partículas cargadas. De hecho, teóricamente se ha mostrado que el grafeno puede ser descrito como un líquido de Fermi [22] con partículas que no interactúan a energías bajas, y experimentalmente se ha probado que los efectos de muchos cuerpos para grafeno son irrelevantes para energías menores a $1eV$ [42]. Tomemos entonces el Hamiltoniano para una sola partícula. En el capítulo de introducción vimos que este Hamiltoniano, para un electrón con vector de onda cercano al punto K de la primera zona de Brillouin puede escribirse como,

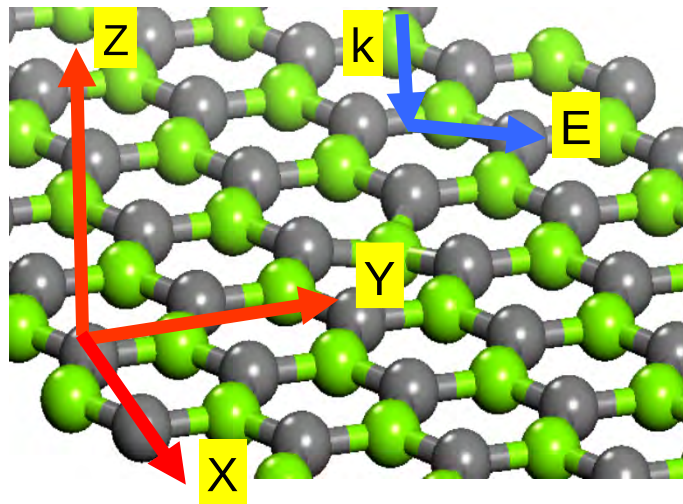


Figura 3.1: Red de grafeno. Los átomos de la subred A se muestran con un color distinto a los de la subred B . El vector \mathbf{k} que es perpendicular al plano, es la dirección en que se propaga la onda y el vector de campo eléctrico \mathbf{E} (en el plano) también son mostrados.

$$H(x, y, t) = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & v_F (\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ v_F (\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & \epsilon_0 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi $v_F \approx c/300$, con c la velocidad de la luz y \hat{p}_i el operador de momento, con $(i = x, y)$. En esta ecuación hemos introducido ϵ_0 como el punto cero de energía. El efecto del campo de radiación puede incluirse a través del llamado acoplamiento mínimo que consiste en sustituir el operador \hat{p} por el operador $\hat{\pi}$, donde $\hat{\pi} = \hat{p} - e\mathbf{A}/c$, con \mathbf{A} el potencial vectorial del campo electromagnético aplicado. En este caso como estamos tomando una onda electromagnética que se propaga perpendicular a la muestra de grafeno \mathbf{A} en unidades *cgs* puede escribirse como

$$\mathbf{A} = \frac{cE_0}{\omega} \cos(kz - \omega t) (\varepsilon_x, \varepsilon_y, 0), \quad (3.2)$$

donde E_0 es la amplitud de la onda electromagnética, ω es su frecuencia y $\varepsilon = (\varepsilon_x, \varepsilon_y, 0)$ el vector de polarización del campo. Podemos considerar que la amplitud de la onda electromagnética E_0 no se atenúa considerablemente y ponerla como constante, debido a que en el grafeno los efectos de apantallamiento son mucho más débiles que en el caso de los metales, esto se debe principalmente a dos factores, el primero es su dimensionalidad y el segundo su baja densidad de estados cercanos a la energía de Fermi [102].

Los campos magnético \mathbf{B} y eléctrico \mathbf{E} correspondientes a este potencial vectorial dado por la Ec.(3.2) son

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \frac{ck}{\omega} E_0 \text{sen}(kz - \omega t) (\varepsilon_y, -\varepsilon_x, 0), \quad (3.3)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -E_0 \text{sen}(kz - \omega t) (\varepsilon_x, \varepsilon_y, 0), \quad (3.4)$$

además el potencial vectorial esta escrito en la norma de Coulomb, es decir,

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (3.5)$$

Para estudiar la dinámica de partículas cargadas en grafeno necesitamos resolver la ecuación de Dirac

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0 & v_F (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y) \\ v_F (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y) & \epsilon_0 \end{pmatrix} \Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t}, \quad (3.6)$$

donde

$$\Psi(x, y, t) = e^{-i\epsilon_0 t/\hbar} \begin{pmatrix} \Psi_A(x, y, t) \\ \Psi_B(x, y, t) \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

es un espinor de dos componentes. Los subíndices A y B se refieren a la subred en que se encuentra el electrón. Introduciendo la Ec.(3.7) dentro de la Ec.(3.6), obtenemos

$$\begin{pmatrix} 0 & v_F (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y) \\ v_F (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(x, y, t) \\ \Psi_B(x, y, t) \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi_A(x, y, t) \\ \Psi_B(x, y, t) \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Esta ecuación matricial es la ecuación más general que describe el problema de cargas en grafeno sometidas a radiación electromagnética con incidencia normal a la muestra. Para ver los efectos del campo electromagnético aplicado de forma más explícita necesitamos hacer el siguiente procedimiento. Tomemos la ecuación anterior y escribamosla en componentes

$$v_F (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y) \Psi_B(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi_A(x, y, t)}{\partial t}, \quad (3.9)$$

$$v_F (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y) \Psi_A(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi_B(x, y, t)}{\partial t}. \quad (3.10)$$

Multiplicando la primera de estas ecuaciones por $v_F (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y)$ y la segunda por $v_F (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y)$ obtenemos

$$v_F^2 (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y) (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y) \Psi_B(x, y, t) = i\hbar v_F (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y) \frac{\partial \Psi_A(x, y, t)}{\partial t}, \quad (3.11)$$

$$v_F^2 (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y) (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y) \Psi_A(x, y, t) = i\hbar v_F (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y) \frac{\partial \Psi_B(x, y, t)}{\partial t}. \quad (3.12)$$

Desarrollemos ahora el producto de los operadores $(\hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y) (\hat{\pi}_x \mp i\hat{\pi}_y)$, tenemos

$$(\hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y) (\hat{\pi}_x \mp i\hat{\pi}_y) = \hat{\pi}_x^2 + \hat{\pi}_y^2 \mp i[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y]. \quad (3.13)$$

Por otra parte el producto de operadores $(\hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y) \partial/\partial t$, puede expresarse como

$$(\hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y) \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y) - \left[\frac{\partial}{\partial t}, \hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y \right]. \quad (3.14)$$

Sustituyendo estas expresiones en las Ecs.(3.11) y (3.12) obtenemos las siguientes relaciones

$$v_F^2 \left(\hat{\pi}_x^2 + \hat{\pi}_y^2 - i[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] \right) \Psi_B(x, y, t) = i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial t} (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y) \Psi_A(x, y, t) - i\hbar v_F \left[\frac{\partial}{\partial t}, \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y \right] \Psi_A(x, y, t), \quad (3.15)$$

$$v_F^2 \left(\hat{\pi}_x^2 + \hat{\pi}_y^2 + i[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] \right) \Psi_A(x, y, t) = i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial t} (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y) \Psi_B(x, y, t) - i\hbar v_F \left[\frac{\partial}{\partial t}, \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \right] \Psi_B(x, y, t). \quad (3.16)$$

Los conmutadores $[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y]$ y $[\partial/\partial t, \hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y]$ (ver apéndice B) tienen los siguientes valores

$$[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] = \frac{i\hbar e}{c} \mathcal{B}_z, \quad (3.17)$$

donde \mathcal{B}_z es el campo magnético en la dirección z y

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}, \hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y \right] = e(E_x \pm iE_y), \quad (3.18)$$

con E_x y E_y son los campos eléctricos en las direcciones x y y respectivamente. Usando estos conmutadores podemos expresar las Ecs.(3.15) y (3.16) en la siguiente manera

$$v_F^2 \left(\hat{\pi}_x^2 + \hat{\pi}_y^2 + \frac{\hbar e}{c} \mathcal{B}_z \right) \Psi_B(x, y, t) = i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial t} (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y) \Psi_A(x, y, t) - i\hbar v_F e (E_x + iE_y) \Psi_A(x, y, t), \quad (3.19)$$

$$v_F^2 \left(\hat{\pi}_x^2 + \hat{\pi}_y^2 - \frac{\hbar e}{c} \mathcal{B}_z \right) \Psi_A(x, y, t) = i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial t} (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y) \Psi_B(x, y, t) - i\hbar v_F e (E_x - iE_y) \Psi_B(x, y, t). \quad (3.20)$$

Puesto que los operadores $\hat{\pi}_i$ tienen la siguiente forma $\hat{\pi}_i = \hat{p}_i - e/cA_i$, obtenemos que lo siguiente es válido

$$\hat{\pi}_i^2 \Psi_\alpha = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi_\alpha}{\partial x_i^2} + 2i\hbar \frac{e}{c} A_i \frac{\partial \Psi_\alpha}{\partial x_i} + i\hbar \frac{e}{c} \Psi_\alpha \frac{\partial A_i}{\partial x_i} + \frac{e^2}{c^2} A_i^2, \quad (3.21)$$

donde el subíndice i se refiere a las coordenadas x o y y el subíndice α se refiere a la subred en que se mueve, esto es, A o B . Para escribir esta última ecuación hemos considerado la condición expresada en la Ec.(3.5) que es la llamada norma de Coulomb. Usando las Ecs. (3.9) y (3.10) podemos expresar las ecuaciones anteriores como

$$\left\{ -\hbar^2 \left[v_F^2 \nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] - 2i\hbar \frac{e}{c} v_F^2 (\mathbf{A} \cdot \nabla) + v_F^2 \left[\left(\frac{e}{c} \right)^2 A^2 + \frac{\hbar e}{c} \mathcal{B}_z \right] \right\} \Psi_B(x, y, t) = -i\hbar v_F e (E_x + iE_y) \Psi_A(x, y, t), \quad (3.22)$$

$$\left\{ -\hbar^2 \left[v_F^2 \nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] - 2i\hbar \frac{e}{c} v_F^2 (\mathbf{A} \cdot \nabla) + v_F^2 \left[\left(\frac{e}{c} \right)^2 A^2 - \frac{\hbar e}{c} \mathcal{B}_z \right] \right\} \Psi_A(x, y, t) = -i\hbar v_F e (E_x - iE_y) \Psi_B(x, y, t), \quad (3.23)$$

estas expresiones pueden compactarse en una sola ecuación para obtener

$$\left\{ -\hbar^2 \left[v_F^2 \nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] - 2i\hbar \frac{e}{c} v_F^2 (\mathbf{A} \cdot \nabla) + v_F^2 \left[\left(\frac{e}{c} \right)^2 A^2 - \frac{\hbar e}{c} \sigma_z \mathcal{B}_z \right] \right\} \Psi(x, y, t) = -i\hbar v_F e (\sigma_x E_x + \sigma_y E_y) \Psi(x, y, t), \quad (3.24)$$

donde σ_i ($i = x, y, z$) son las matrices de Pauli

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

y

$$\Psi(x, y, t) = \begin{pmatrix} \Psi_A(x, y, t) \\ \Psi_B(x, y, t) \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Escribiendo las expresiones para los campos eléctrico \mathbf{E} , magnético \mathbf{B} y el potencial vectorial \mathbf{A} , dadas por las Ecs.(3.4), (3.3) y (3.2) en la ecuación (3.24) obtenemos

$$\begin{aligned} & \left\{ -\hbar^2 \left[v_F^2 \nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] - 2i\hbar v_F \xi \cos \phi \left(\varepsilon_x \frac{\partial}{\partial x} + \varepsilon_y \frac{\partial}{\partial y} \right) + \xi^2 \cos^2 \phi \right\} \Psi(x, y, t) \\ & = +i\hbar\omega (\sigma_x \varepsilon_x + \sigma_y \varepsilon_y) \xi \text{sen} \phi \Psi(x, y, t), \end{aligned} \quad (3.27)$$

con $\phi = kz - \omega t$ y donde hemos definido el parámetro ξ que tiene unidades de energía como

$$\xi = \frac{eE_0 v_F}{\omega}. \quad (3.28)$$

En esta ecuación puede verse que el campo magnético \mathbf{B} , al no tener componente en la dirección z no produce ningún efecto sobre los estados propios del problema. Esto contrasta con el caso del campo eléctrico de la onda electromagnética, pues este si genera un efecto y es el acoplamiento entre las ecuaciones de las funciones de onda de las subredes A y B . Otro de los efectos de este campo eléctrico, es producir una corriente dependiente del tiempo $\mathbf{j}(t)$ en la muestra, como se verá en el desarrollo de este estudio. En general, esta corriente dependiente del tiempo, crea un campo eléctrico inducido $\mathbf{E}^{ind}(t)$ que también actúa sobre las cargas, por lo tanto, debe ser añadido al campo eléctrico de la Ec.(3.4). Así, para calcular la respuesta del sistema, uno debe considerar además del campo eléctrico externo Ec.(3.4), el campo inducido $\mathbf{E}^{ind}(t)$. En las siguientes secciones y en el siguiente capítulo de este trabajo, nosotros no consideremos el campo eléctrico inducido. Esto puede hacerse de manera consistente siempre que la razón de decaimiento radiactivo Γ , que en el caso de grafeno esta dada por $\Gamma = 2e^2 \epsilon_F / \hbar^2 c = (2v_F e^2 \sqrt{\pi n_e}) / \hbar c$ (donde ϵ_F es la energía del nivel de Fermi y n_e es la densidad de electrones), sea mucho menor que la frecuencia de la onda de radiación ω que estamos considerando. Para densidades experimentales relevantes $n_e \approx 10^{11} \text{cm}^{-2}$, el valor de Γ es $\Gamma = 2,58 \text{THz}$, lo cual nos indica que el campo inducido $\mathbf{E}^{ind}(t)$ es relevante para el estudio de el problema en una amplia zona del espectro. Sin embargo, no considerar este campo inducido, no demerita el estudio que se realiza en esta tesis, pues es un primer acercamiento a entender el comportamiento de cargas en grafeno interactuando con radiación.

Pasemos ahora a resolver el problema planteado, en las siguientes secciones de este capítulo propondremos dos maneras para encontrar su solución. La primera de estas formas se basará en aplicar una transformación unitaria compuesta de dos transformaciones una de estas transformaciones nos llevará a estudiar el problema en la base de espinores de pseudohelicidad y la otra transformación será una rotación por un ángulo ωt alrededor del eje z . En cuanto a la segunda manera que estudiaremos para dar solución a nuestro problema, esta se basará en utilizar una función de onda de prueba junto con la Ec.(3.27). En ambos casos intentaremos encontrar ecuaciones más sencillas de resolver de tal manera que nos den una perspectiva sobre los que sucede a los electrones en la muestra de grafeno. Demos paso a estas secciones.

3.2. Método de solución usando una transformación unitaria

En esta sección vamos estudiar una solución aproximada de la Ec.(3.8). Usaremos para esto un método en el que aplicaremos una transformación unitaria a la ecuación de Dirac que describe nuestro problema.

Para iniciar simplifiquemos el problema un poco tomemos en lugar del potencial vectorial \mathbf{A} más general, dado por la Ec.(3.2), un potencial vectorial que tenga vector de polarización a lo largo del eje y , es decir,

$$\mathbf{A} = \frac{cE_0}{\omega} \cos(kz - \omega t) \hat{j}. \quad (3.29)$$

El problema con el potencial vectorial más general también puede ser analizado, solo que en ese caso se complica la forma de la ecuación final que se tiene que estudiar y por lo tanto preferimos comenzar con un problema más sencillo de resolver.

Regresando a nuestra discusión, si además consideramos el límite de onda larga ($\lambda \rightarrow \infty$) debido a que estamos suponiendo que las dimensiones de la muestra de grafeno estudiada son pequeñas, se sigue entonces

$$\mathbf{A} = \frac{cE_0}{\omega} \cos \omega t \hat{j}. \quad (3.30)$$

Usando el potencial vectorial anterior, la Ec.(3.8) puede reescribirse como

$$\begin{pmatrix} 0 & v_F(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) - i\xi \cos \omega t \\ v_F(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) + i\xi \cos \omega t & 0 \end{pmatrix} \Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t}, \quad (3.31)$$

donde ξ es el parámetro definido en la Ec.(3.28) y en este caso el espinor $\Psi(x, y, t)$, es

$$\Psi(x, y, t) = \begin{pmatrix} \Psi_A(x, y, t) \\ \Psi_B(x, y, t) \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

La Ec.(3.31) puede expresarse también en la siguiente forma

$$(H_0 + H_1) \Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t}, \quad (3.33)$$

donde

$$H_0 = v_F \begin{pmatrix} 0 & (\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ (\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

y

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i\xi \cos \omega t \\ i\xi \cos \omega t & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.35)$$

Apliquemos una transformación unitaria $U(t) = WR(t)$ compuesta por dos transformaciones unitarias W y $R(t)$ a nuestro problema. La primera transformación W nos llevara a describir nuestro problema de la base de espinores de pseudoespín a la base de espinores de pseudohelicidad (ver apéndice C)

$$W = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{i\theta} & -e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad \tan \theta = \left(\frac{p_y}{p_x} \right). \quad (3.36)$$

La transformación $R(t)$, por otra parte, es una rotación por un ángulo temporal ωt a lo largo del eje z y se puede escribir como [23]

$$R(t) = e^{-i\sigma_z \omega t/2} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}.$$

Tenemos entonces que la función de onda de nuestro problema se transforma de la siguiente manera

$$\Psi(x, y, t) = U(t) \Psi'(x, y, t) \quad (3.37)$$

y la Ec.(3.33) puede escribirse como

$$\begin{aligned} (H_0 + H_1) U(t) \Psi'(x, y, t) &= i\hbar \frac{\partial U(t) \Psi'(x, y, t)}{\partial t} \\ &= i\hbar U(t) \frac{\partial \Psi'(x, y, t)}{\partial t} + i\hbar \Psi'(x, y, t) \frac{\partial U(t)}{\partial t}, \end{aligned} \quad (3.38)$$

puesto que $U^\dagger(t) U(t) = I$. Multiplicando la ecuación anterior por $U^\dagger(t)$ por la izquierda obtenemos

$$U^\dagger(t) (H_0 + H_1) U(t) \Psi'(x, y, t) - i\hbar U^\dagger(t) \frac{\partial U(t)}{\partial t} \Psi'(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi'(x, y, t)}{\partial t}. \quad (3.39)$$

Hagamos ahora la transformación de cada uno de los términos de nuestro hamiltoniano, comenzando por H_0 tenemos

$$U^\dagger(t) H_0 U(t) = v_F \begin{pmatrix} \|\widehat{p}\| & 0 \\ 0 & -\|\widehat{p}\| \end{pmatrix}, \quad (3.40)$$

donde $\|\widehat{p}\| = \sqrt{\widehat{p}_x^2 + \widehat{p}_y^2}$ (ver apéndice C).

El Hamiltoniano H_1 transformado puede escribirse como

$$U^\dagger(t) H_1 U(t) = \xi \cos \omega t \begin{pmatrix} \text{sen} \theta & i \cos \theta e^{i\omega t} \\ -i \cos \theta e^{-i\omega t} & -\text{sen} \theta \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

y el término $i\hbar U^\dagger(t) \frac{\partial U(t)}{\partial t}$ se expresa de la siguiente manera,

$$i\hbar U^\dagger(t) \frac{\partial U(t)}{\partial t} = -\hbar \omega \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & +\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

Luego entonces, el problema que se tiene que resolver es

$$\begin{pmatrix} v_F \|\widehat{p}\| - 1/2\hbar\omega + \xi \cos \omega t \text{sen} \theta & i\xi \cos \omega t \cos \theta e^{i\omega t} \\ -i\xi \cos \omega t \cos \theta e^{-i\omega t} & -v_F \|\widehat{p}\| + 1/2\hbar\omega - \xi \cos \omega t \text{sen} \theta \end{pmatrix} \Psi' = i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t}. \quad (3.43)$$

Para avanzar en su solución hagamos algunas aproximaciones. En primer lugar tomemos $p_x \gg p_y$, esto se cumple si la mayoría de los electrones son inyectados con velocidad más grande en la dirección x . Se sigue entonces que $\cos \theta \approx 1$, $\text{sen} \theta \approx \theta$ y $\|p\| \approx p_x$, por lo tanto, a primer orden tenemos

$$\begin{pmatrix} v_F \widehat{p}_x - 1/2\hbar\omega & i\xi \cos \omega t e^{i\omega t} \\ -i\xi \cos \omega t e^{-i\omega t} & -v_F \widehat{p}_x + 1/2\hbar\omega \end{pmatrix} \Psi' = i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t}, \quad (3.44)$$

$$\begin{pmatrix} v_F \widehat{p}_x - 1/2\hbar\omega & i\frac{\xi}{2} (e^{i2\omega t} + 1) \\ -i\frac{\xi}{2} (1 + e^{-2i\omega t}) & -v_F \widehat{p}_x + 1/2\hbar\omega \end{pmatrix} \Psi' = i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t}. \quad (3.45)$$

El Hamiltoniano de la ecuación anterior es periódico en el tiempo con periodo $T = 2\pi/\omega$. Puede entonces usarse el formalismo de Floquet descrito en el apéndice D, tal formalismo nos dice que las soluciones de la ecuación anterior pueden expresarse como

$$\Psi'(x, t) = e^{-i(\epsilon_\alpha + n\hbar\omega)t/\hbar} \Phi_\alpha(x, t), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (3.46)$$

donde $\Phi_\alpha(x, t)$ es el modo de Floquet que cumple la condición de ser periódico en el tiempo

$$\Phi_\alpha(x, t) = \Phi_\alpha(x, t + T), \quad (3.47)$$

y ϵ_α es la llamada cuasienergía. Sustituyendo esta solución en el Hamiltoniano (3.45) obtenemos que el modo de Floquet debe de satisfacer la relación

$$\begin{pmatrix} v_F \hat{p}_x - \hbar\omega(n + 1/2) & i\frac{\xi}{2}(e^{i2\omega t} + 1) \\ -i\frac{\xi}{2}(1 + e^{-2i\omega t}) & -v_F \hat{p}_x - \hbar\omega(n - 1/2) \end{pmatrix} \Phi_\alpha - i\hbar \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial t} = \epsilon_\alpha \Phi_\alpha. \quad (3.48)$$

Haciendo ahora una aproximación del tipo de onda rotatoria en la que se desprecian los términos que contengan $\exp(\pm 2i\omega t)$, ya que son términos que oscilan más rápido comparados con los términos constantes y a una escala de tiempo apreciable tenderán a un promedio de cero. Llegamos entonces a una ecuación mucho más sencilla de resolver,

$$\begin{pmatrix} v_F \hat{p}_x - \hbar\omega(n + 1/2) & i\frac{\xi}{2} \\ -i\frac{\xi}{2} & -v_F \hat{p}_x - \hbar\omega(n - 1/2) \end{pmatrix} \Phi_\alpha - i\hbar \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial t} = \epsilon_\alpha \Phi_\alpha. \quad (3.49)$$

Esta última ecuación ya no tiene dependencia temporal y tiene simetría translacional en la dirección x . Proponemos, por lo tanto, una solución del siguiente tipo

$$\Phi_\alpha(x) = e^{-ik_x x} \mathbf{u}. \quad (3.50)$$

donde \mathbf{u} es un espinor constante que se obtiene a partir de resolver la siguiente ecuación de eigenvalores

$$\begin{pmatrix} v_F \hbar k_x - \hbar\omega(n + 1/2) - \epsilon & i\frac{\xi}{2} \\ -i\frac{\xi}{2} & -v_F \hbar k_x - \hbar\omega(n - 1/2) - \epsilon \end{pmatrix} \mathbf{u} = 0. \quad (3.51)$$

Para encontrar los estados propios solución del problema, como es usual primero encontramos los valores propios de la energía haciendo el determinante de la matriz igual a cero, obtenemos

$$\epsilon = -n\hbar\omega \pm \sqrt{\left(v_F \hbar k_x - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\xi}{2}\right)^2}. \quad (3.52)$$

Los espinores \mathbf{u} que se obtienen a partir de estas energías propias son

$$\mathbf{u}_- = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-v_F \hbar k_x + \hbar\omega/2 + \sqrt{\left(v_F \hbar k_x - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\xi}{2}\right)^2}}{i\xi/2} \end{pmatrix}, \quad (3.53)$$

que corresponde al estado con el signo menos en la raíz de la Ec.(3.52) y

$$\mathbf{u}_+ = \begin{pmatrix} \frac{-v_F \hbar k_x + \hbar\omega/2 + \sqrt{\left(v_F \hbar k_x - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 + \left(\frac{\xi}{2}\right)^2}}{i\xi/2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.54)$$

que es el caso para la energía propia con signo mas en la raíz de la Ec.(3.52). Cuando no hay campo de radiación $\xi \rightarrow 0$, estos espinores se reducen a los del caso de partícula libre

$$\mathbf{u}_- = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

y

$$\mathbf{u}_+ = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$

como debe ser.

Hablemos ahora del espectro determinado por la Ec.(3.52), el término $n\hbar\omega$ proporciona el número de fotones absorbidos por las partículas cargadas en la muestra de grafeno. Otra cosa importante a señalar que se concluye de esta misma ecuación es que al aplicar radiación a la muestra de grafeno se abre una brecha de energía de tamaño

$$\Delta = \xi = \frac{eE_0v_F}{\omega} \quad (3.57)$$

lo que equivale a que las partículas pierdan su carácter de partículas sin masa. Vemos que la dependencia funcional con la amplitud del campo de radiación a primer orden es lineal.

3.3. Método de solución usando una función de prueba.

En esta sección presentamos otro método más exacto que la aproximación anterior para dar solución al problema de grafeno sometido a radiación. Usaremos una función de onda de prueba que al introducirla en la Ec.(3.24) nos permita obtener una ecuación más sencilla para resolver. Pasemos a los detalles de este análisis. Consideremos un caso específico de la Ec.(3.24), tomando una onda electromagnética que se propaga en la dirección z y con vector de polarización en la dirección de x , es decir

$$\mathbf{A} = \frac{c}{\omega} E_0 \cos(kz - \omega t) \hat{i}. \quad (3.58)$$

Luego entonces, los campos eléctrico y magnético correspondientes a este potencial vectorial son

$$\mathbf{B} = -\frac{ck}{\omega} E_0 \text{sen}(kz - \omega t) \hat{j}, \quad (3.59)$$

$$\mathbf{E} = -E_0 \text{sen}(kz - \omega t) \hat{i}, \quad (3.60)$$

y la ecuación espinorial (3.24) con estos campos puede escribirse como

$$\left\{ -\hbar^2 \left[v_F^2 \nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] - 2i\hbar v_F \xi \cos \phi \frac{\partial}{\partial x} + \xi^2 \cos^2 \phi - i\hbar \omega \xi \sigma_x \text{sen} \phi \right\} \Psi(x, y, t) = 0, \quad (3.61)$$

donde $\phi = kz - \omega t$ y ξ es el mismo parámetro con unidades de energía que se derivó en la primera sección de este capítulo

$$\xi = \frac{eE_0v_F}{\omega}. \quad (3.62)$$

Si suponemos que la muestra de grafeno es casi plana, podemos poner $z = 0$ y obtenemos la ecuación

$$\left\{ -\hbar^2 \left[v_F^2 \nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] - 2i\hbar v_F \xi \cos \omega t \frac{\partial}{\partial x} + \xi^2 \cos^2 \omega t - i\hbar \omega \xi \sigma_x \text{sen} \omega t \right\} \Psi(x, y, t) = 0. \quad (3.63)$$

Considerese ahora una solución de la siguiente forma

$$\Psi = e^{ip_x x/\hbar + ip_y y/\hbar} \mathbf{F}(\omega t), \quad (3.64)$$

donde $\mathbf{F}(\omega t)$ es un espinor que es función de ωt . Después de introducir esta función de onda de prueba en la Ec.(3.63), resulta la siguiente ecuación para el espinor $\mathbf{F}(\omega t)$,

$$\mathbf{F}''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} + \frac{1}{(\hbar\omega)^2} (\xi^2 \cos^2 \omega t + 2\xi v_F p_x \cos \omega t - i\hbar \omega \xi \sigma_x \text{sen} \omega t) \right\} \mathbf{F}(\omega t) = 0, \quad (3.65)$$

con $\epsilon = v_F \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$. Esta última ecuación es de hecho un par de ecuaciones diferenciales acopladas y es en general difícil de resolver. Tomando en cuenta este hecho comencemos estudiando un problema más sencillo, consideremos como condición inicial $p_x = 0$, entonces el parámetro importante en nuestra ecuación es $\xi/\hbar\omega$.

Existen tres casos límite para estudiar asociados a los valores del parámetro mencionado. El primero es cuando $\xi = 0$, que nos sirve como una prueba para determinar si la ecuación anterior da la expresión correcta cuando no hay campo de radiación sobre la muestra de grafeno. Los otros dos corresponden a los límites en que $\xi/\hbar\omega \gg 1$ y $\xi/\hbar\omega \ll 1$. Que corresponden a campos eléctricos intensos y campos eléctricos débiles. El parámetro $\xi/\hbar\omega$ normalmente tiene un valor grande, por ejemplo, para los campos normalmente usados en situaciones experimentales con amplitudes de $E_0 = 3V/cm$ y con frecuencias del orden de $\omega = 50GHz$, se obtiene $\xi/\hbar\omega \approx 200$. Es muy importante mencionar que la ecuación que estamos estudiando proviene de una aproximación de amarre fuerte, como se planteo en el primer capítulo de esta tesis. Por lo tanto, en el límite de campos eléctricos realmente muy intensos nuestro estudio no es válido debido a que esta aproximación en tales circunstancias puede ser modificada sustancialmente. La frecuencia límite para usar el modelo de Dirac es de aproximadamente $\omega \sim 4 \times 10^{15} Hz$ [103]. Para campos con frecuencias mayores deben usarse modelos teóricos basados en otras teorías de interacción de ondas electromagnéticas con materia. Tomando en cuenta estas aseveraciones, analicemos ahora la naturaleza de cada una de las soluciones que corresponden a los tres casos límite expuestos.

3.3.1. Electrones libres.

El primer caso con $\xi = 0$, corresponde a la situación en que no hay onda electromagnética interactuando con las cargas en la red de grafeno. Es decir, no hay interacción entre las partículas cargadas de la red y la onda electromagnética. Tenemos, en consecuencia, partículas libres en la muestra de grafeno. La ecuación para $\mathbf{F}(\omega t)$ queda expresada como

$$\mathbf{F}''(\omega t) + \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} \mathbf{F}(\omega t) = 0, \quad (3.66)$$

cuya solución es

$$\mathbf{F}(\omega t) = e^{\pm i\epsilon t/\hbar} \mathbf{u}. \quad (3.67)$$

Esta es la solución del problema de una partícula libre en la red de grafeno donde \mathbf{u} es el siguiente espinor (ver apéndice C)

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad \theta = \tan\left(\frac{p_y}{p_x}\right), \quad (3.68)$$

los signos + y - corresponden a electrones y huecos respectivamente.

3.3.2. Campos eléctricos intensos

En este caso $\xi/\hbar\omega \gg 1$, podemos despreciar los términos lineales en $\xi/\hbar\omega$ en la Ec.(3.65). Se obtiene entonces la siguiente ecuación para $\mathbf{F}(\omega t)$,

$$\mathbf{F}''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} + \frac{\xi^2}{(\hbar\omega)^2} \cos^2 \omega t \right\} \mathbf{F}(\omega t) = 0. \quad (3.69)$$

Usando la relación $\cos^2(\omega t) = (1 + \cos 2\omega t)/2$ podemos escribir

$$\mathbf{F}''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} + \frac{\xi^2}{(\hbar\omega)^2} \left[\frac{1}{2} (1 + \cos 2\omega t) \right] \right\} \mathbf{F}(\omega t) = 0, \quad (3.70)$$

definiendo

$$q = -\frac{\xi^2}{4(\hbar\omega)^2} \quad (3.71)$$

y

$$a = \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} - 2q, \quad (3.72)$$

obtenemos la ecuación

$$\mathbf{F}''(\omega t) + \{a - 2q \cos 2\omega t\} \mathbf{F}(\omega t) = 0, \quad (3.73)$$

que es un conjunto de dos ecuaciones de Mathieu desacopladas y escritas en la forma estandar. Las soluciones de cada una de las ecuaciones de Mathieu anteriores son las funciones de Mathieu

$$F(\omega t) = ce_\mu(\omega t, q) \quad (3.74)$$

y

$$F(\omega t) = se_\mu(\omega t, q), \quad (3.75)$$

donde $ce_\mu(\omega t, q)$ y $se_\mu(\omega t, q)$ son las funciones periódicas pares e impares de Mathieu [68]. Existe un conjunto de eigenvalores representado por $a_r(q)$ (el espectro de la ecuación) para ambos tipos de funciones.

Para encontrar este conjunto usamos la teoría de Floquet (ver apéndice D) y las funciones par de Mathieu. De acuerdo a esta teoría la función $ce_r(\omega t, q)$ puede escribirse como

$$F(\omega t) = ce_r(\omega t, q) = e^{-i\mu\omega t}\Phi(\omega t), \quad (3.76)$$

donde $\Phi(\omega t)$ es una función periódica y la hemos escogido con periodo π , por lo tanto,

$$F(\omega t) = \sum_{r=-\infty}^{r=\infty} C_{2r}(\mu; a, q) e^{i(2r-\mu)\omega t}, \quad (3.77)$$

donde $C_{2r}(\mu; a, q)$ son coeficientes de Fourier. Si la Ec.(3.77) es introducida en la Ec.(3.73) se obtiene la siguiente relación de recurrencia,

$$C_{2r} + \frac{q}{(2r-\mu)^2 - a} (C_{2r+2} + C_{2r-2}) = 0. \quad (3.78)$$

Definiendo

$$\gamma_{2r} = \frac{q}{(2r-\mu)^2 - a}, \quad \text{para toda } r \in \mathbb{Z}, \quad (3.79)$$

podemos escribir el conjunto de ecuaciones dadas por (3.78) de la siguiente manera

$$\Xi_r(\mu, a, q) \mathbf{C} = \mathbf{0}, \quad (3.80)$$

donde

$$\Xi_r(\mu, a, q) = \begin{pmatrix} 1 & \gamma_{2r} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma_{2r-2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \gamma_0 & 1 & \gamma_0 & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \gamma_{-2r+2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma_{-2r} & 1 \end{pmatrix} \quad (3.81)$$

y \mathbf{C} es el vector de coeficientes de Fourier

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}. \quad (3.82)$$

Encontrar las soluciones no triviales de la Ec.(3.73) es equivalente a demandar que

$$\det(\Xi_r(\mu, a, q)) = 0. \quad (3.83)$$

Usemos ahora el método propuesto por Whittaker [104], para encontrar μ como función de a y q . Comencemos por introducir la siguiente cantidad [104],

$$\lambda = \frac{1}{\cos(i\pi\mu) - \cos(\pi\sqrt{a})}. \quad (3.84)$$

Esta cantidad tiene los mismos polos que los que tiene el $\det(\Xi_r(\mu, a, q)) = 0$. Adicionalmente,

$$\lim_{\mu \rightarrow \pm\infty} \lambda \sim \lim_{\mu \rightarrow \pm\infty} \frac{1}{e^{\pi\mu}} \rightarrow 0. \quad (3.85)$$

Por lo tanto, si definimos,

$$\eta = \det(\Xi_r(\mu, a, q)) - k\lambda. \quad (3.86)$$

Tenemos que en el límite $\mu \rightarrow \pm\infty$, η esta acotado y su valor es,

$$\lim_{\mu \rightarrow \pm\infty} \eta = 1. \quad (3.87)$$

Este resultado es consecuencia de la Ec.(3.85) y del siguiente hecho,

$$\lim_{\mu \rightarrow \pm\infty} \det(\Xi_r(\mu, a, q)) = 1. \quad (3.88)$$

Invocando el teorema de Liouville que dice: si una función es analítica en todos los puntos del plano complejo y está acotada, entonces esta función tiene un valor constante. Aplicandolo a nuestro problema, se desprende de la Ec.(3.87), que la cantidad

$$k = \frac{\det(\Xi_r(\mu, a, q)) - 1}{\lambda}, \quad (3.89)$$

debe ser constante. Evaluemos en un punto particular a k , por ejemplo en $\mu = 0$. Obtenemos entonces

$$k = (\det(\Xi_r(0, a, q))) (1 - \cos \pi\sqrt{a}). \quad (3.90)$$

Ahora bien usando las Ecs.(3.89) y (3.90) obtenemos la siguiente igualdad

$$\frac{\det(\Xi_r(\mu, a, q)) - 1}{\lambda} = (\det(\Xi_r(0, a, q))) (1 - \cos \pi\sqrt{a}). \quad (3.91)$$

Para nuestros propositos $\det(\Xi_r(\mu, a, q)) = 0$, por lo tanto,

$$\mu = \frac{1}{\pi} \cos^{-1} (1 - \det(\Xi_r(0, a, q)) (1 - \cos \pi\sqrt{a})) \quad a \geq 0 \quad (3.92)$$

y

$$\mu = \frac{1}{\pi} \cos^{-1} (1 - \det(\Xi_r(0, a, q)) (1 - \cosh \pi\sqrt{a})) \quad a < 0 \quad (3.93)$$

Para poder encontrar el espectro nos falta conocer el valor del determinante infinito $\det(\Xi_r(0, a, q))$. Para evaluarlo, usamos el método recursivo de Strang [105], que produce la siguiente relación,

$$\det(\Xi_r(0, a, q)) = \beta_{2r} \det(\Xi_{r-1}(0)) - \alpha_{2r} \beta_{2r} \det(\Xi_{r-2}(0)) + \alpha_{2r} \alpha_{2r-2}^2 \det(\Xi_{r-3}(0)) \quad (3.94)$$

donde $\alpha_{2r} = \gamma_{2r} \gamma_{2r-2}$ y $\beta_{2r} = 1 - \alpha_{2r}$.

En la Fig.(3.2) presentamos el espectro obtenido de las Ecs.(3.92) y (3.93), en el cual las zonas oscuras son zonas de energía permitida. El programa para dibujar el espectro se puede ver en el apéndice E. Este espectro es el espectro usual de una ecuación de Mathieu. Sin embargo, en el presente caso existe una constricción extra que relaciona a los parámetros a y q a través de la Ec.(3.72). Para energías fijas ϵ , esta condición equivale a dibujar un conjunto de líneas paralelas a la línea dibujada en la Fig.(3.2) y en

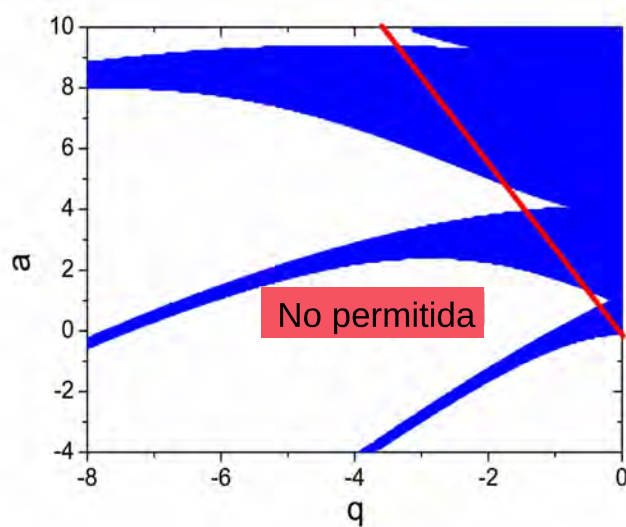


Figura 3.2: Espectro de energías para el caso de campos eléctricos intensos. Aquí $a = \epsilon^2 / (\hbar\omega)^2 - 2q$ y $q = (\xi/2\hbar\omega)^2$. La línea $a = -2q$ señalando las regiones de energías permitidas y prohibidas también es mostrada.

dirección positiva de q . Como $(\epsilon/\hbar\omega)^2$ es siempre positivo, en la Fig.(3.2), dibujamos la línea $a = -2q$, que divide al espectro en dos zonas. Las energías del lado izquierdo de esta línea son valores de energía no permitidos, mientras que valores de lado derecho son permitidos. Los valores sobre la línea tienen $\epsilon = 0$. Debe notarse que para un campo eléctrico fijo, q es una constante. Luego para leer el espectro para una a dada, uno debe dibujar una línea vertical a una q dada. Usando este método, un simple análisis revela bandas separadas por brechas de energía prohibida. Por otra parte, el límite estático $\omega \rightarrow 0$ en que solo el efecto del campo eléctrico es considerable, lo tenemos cuando $q \rightarrow \infty$. Al ver la Fig.(3.2), obtenemos que en ese límite se obtienen líneas en el espectro lo que corresponde al efecto Stark en grafeno.

Pasemos ahora a determinar cual es la dependencia funcional con la amplitud de la onda de radiación E_0 de la brecha de energía prohibida correspondiente a los niveles más bajo del espectro mostrado en la Fig.(3.2). De acuerdo a las aproximaciones para las funciones de Mathieu dadas por M. Abramowitz y I. A. Stegun [68], las curvas que separan estados permitidos y prohibidos en estas bandas más bajas, están dadas por

$$a_1(-q) = 1 - q - \frac{q^2}{8} + \frac{q^3}{64} - \frac{q^4}{1536} - \frac{11q^5}{36864} + \dots, \quad (3.95)$$

y

$$b_1(-q) = 1 + q - \frac{q^2}{8} - \frac{q^3}{64} - \frac{q^4}{1536} + \frac{11q^5}{36864} + \dots \quad (3.96)$$

En la Fig.(3.3) presentamos una ampliación del espectro de la Fig.(3.2) para los niveles de energía más bajos, donde dibujamos la curvas $a_1(-q)$ y $b_1(-q)$ junto con la curva $a = -2q$. Lo primero que notamos es que alrededor del nivel de Fermi no hay banda prohibida. La primera brecha prohibida aparece cuando hay un espacio de energías no permitidas entre las curvas $a_1(-q)$ y $b_1(-q)$. En la Fig.(3.3) presentamos esa brecha, además dibujamos el punto $\mathbf{r}_1 = (-0.3288, 0.6582)$, en el cual $b_1(-q) = -2q$, que es donde la banda prohibida más baja alcanza su magnitud máxima. Y el punto $r_2 = (-0.8989, 1.7863)$, en el que se cumple la condición $a_1(-q) = -2q$ y es donde la banda tiene su magnitud menor siendo esta de cero.

La magnitud de la banda prohibida Δ en unidades de $\hbar\omega$ tiene la siguiente dependencia funcional con q

$$\Delta = \begin{cases} \sqrt{a_1(-q) - b_1(-q)} \approx \sqrt{-2q + q^3/32} & \text{si } 0 \geq q > -0.3288 \\ \sqrt{a_1(-q) + 2q} \approx \sqrt{1 + q - q^2/8} & \text{si } -0.3288 \geq q \geq -0.8989 \end{cases} \quad (3.97)$$

En este caso como $q \ll 1$, recordando la Ec.(3.71), podemos escribir para las magnitudes de la banda prohibida a primer orden

$$\Delta \approx \begin{cases} \sqrt{-2q} = \frac{eE_0 v_F}{\sqrt{2}\hbar\omega^2} & \text{si } 0 \leq E_0 < \frac{1.15(\hbar\omega^2)}{ev_F} \\ \sqrt{1+q} \approx 1 + \frac{1}{2}q = 1 - \frac{(\epsilon E_0 v_F)^2}{8\hbar^2\omega^4} & \text{si } \frac{1.15(\hbar\omega^2)}{ev_F} \leq E_0 \leq \frac{1.9(\hbar\omega^2)}{ev_F} \end{cases} \quad (3.98)$$

Vemos que el ancho de la banda prohibida es proporcional linealmente a E_0 para el intervalo $[0, 1.15\hbar\omega^2/ev_F)$, mientras que en el intervalo $[1.15\hbar\omega^2/ev_F, 1.9\hbar\omega^2/ev_F]$ el ancho de la brecha es proporcional al cuadrado de la amplitud de la onda electromagnética E_0 . El tamaño de la de la banda prohibida en unidades de $\hbar\omega$ para el punto \mathbf{r}_1 donde es máximo es de $\Delta = 0.315$, en tal caso si tomáramos una onda con frecuencia del orden de $100GHz$ necesitaríamos que esta tuviera una amplitud del orden de $E_0 \sim 15V/m$, tales amplitudes y frecuencias son fácilmente obtenidas en situaciones experimentales. A diferencia del método presentado en la sección anterior, la banda prohibida presenta un comportamiento más complejo.

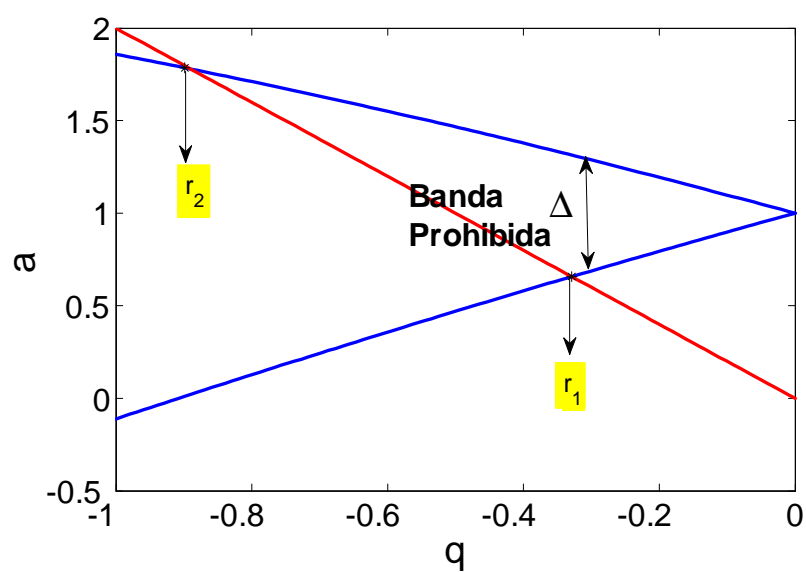


Figura 3.3: Ampliación del espectro de energías en el caso de campos eléctricos fuertes, para el caso de las energías mas bajas. El punto \mathbf{r}_1 indica el punto en que el ancho de la banda prohibida es máximo, mientras que el punto \mathbf{r}_2 , es cuando el ancho de la banda de energía prohibida se hace cero. La recta gris $a = -2q$, corresponde a la constricción.

3.3.3. Campos eléctricos débiles.

En el caso de campos eléctricos débiles tenemos $\xi/\hbar\omega \ll 1$, podemos entonces despreciar términos cuadráticos en la Ec.(3.65) para obtener

$$\mathbf{F}''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} - \frac{i\xi}{\hbar\omega} \sigma_x \text{sen}\omega t \right\} \mathbf{F}(\omega t) = 0. \quad (3.99)$$

La Ec.(3.99) es en realidad un par de ecuaciones acopladas. Para desacoplarlas, procedemos de la siguiente manera. Primero escribamos las ecuaciones explícitas para las componentes del espinor $\mathbf{F}(\omega t)$

$$F_1''(\omega t) + \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} F_1(\omega t) - \frac{i\xi}{\hbar\omega} \text{sen}\omega t F_2(\omega t) = 0, \quad (3.100)$$

$$F_2''(\omega t) + \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} F_2(\omega t) - \frac{i\xi}{\hbar\omega} \text{sen}\omega t F_1(\omega t) = 0. \quad (3.101)$$

Sumando las dos ecuaciones anteriores obtenemos

$$u''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} - \frac{i\xi}{\hbar\omega} \text{sen}\omega t \right\} u(\omega t) = 0, \quad (3.102)$$

donde $u(\omega t) = F_1(\omega t) + F_2(\omega t)$, mientras que si las restamos queda

$$v''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} + \frac{i\xi}{\hbar\omega} \text{sen}\omega t \right\} v(\omega t) = 0, \quad (3.103)$$

aquí $v(\omega t) = F_1(\omega t) - F_2(\omega t)$. En este caso definimos nuevos valores de a y q ,

$$a = \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2}, \quad (3.104)$$

y

$$q = \frac{\xi}{2\hbar\omega}, \quad (3.105)$$

podemos escribir entonces

$$u''(\omega t) + \{a - 2iq\text{sen}\omega t\} u(\omega t) = 0, \quad (3.106)$$

$$v''(\omega t) + \{a + 2iq\text{sen}\omega t\} v(\omega t) = 0. \quad (3.107)$$

Hagamos ahora el siguiente cambio de variable $\phi' = \omega t/2$. Introduciendo esta nueva variable en la Ec.(3.106), obtenemos

$$u''(2\phi') + \{A - 2iQ\text{sen}2\phi'\} u(2\phi') = 0, \quad (3.108)$$

donde $A = 4a$ y $Q = 4q$. Es importante hacer notar que la ecuación para $F_1(\omega t) - F_2(\omega t)$ es muy parecida, el único cambio se encuentra en que en un caso se tiene el término $-2iq\text{sen}\omega t$ y en el otro $2iq\text{sen}\omega t$. Por lo que, solo es necesario resolver la Ec.(3.108) para $q < 0$ y $q > 0$.

Los estados propios de este problema pueden encontrarse con teoría de perturbaciones para ello suponemos que estos tienen el siguiente aspecto

$$u(2\phi', Q) = u_0(2\phi') + Qu_1(2\phi') + Q^2u_2(2\phi') + \dots \quad (3.109)$$

También es necesario suponer que los eigenvalores A pueden expandirse como una serie de potencias de Q , es decir,

$$A = A_0 + QA_1 + Q^2A_2 \dots \quad (3.110)$$

Sustituyendo las Ecs.(3.109)y(3.110) en la Ec.(3.108), y agrupando los términos con potencias en Q iguales, obtenemos el siguiente conjunto de ecuaciones

$$u_0''(2\phi') + A_0u_0(2\phi') = 0, \quad (3.111)$$

$$u_1''(2\phi') + A_0u_1(2\phi') = -A_1u_0(2\phi') + 2iu_0(2\phi') \text{ sen}2\phi', \quad (3.112)$$

$$u_2''(2\phi') + A_0u_2(2\phi') = -A_2u_0(2\phi') - A_1u_1(2\phi') + 2iu_1(2\phi') \text{ sen}2\phi', \quad (3.113)$$

⋮
⋮
⋮

Tomemos el caso en que $A_0 = 0$. En este caso $u_0(2\phi') = a_0$, con a_0 una constante. Con este resultado la Ec.(3.112) se convierte en

$$u_1''(2\phi') = -A_1a_0 + 2ia_0 \text{ sen}2\phi', \quad (3.114)$$

es necesario que $u_1(2\phi')$ sea periódica, por lo tanto, ponemos $A_1 = 0$. Luego entonces la solución de la Ec.(3.114) es,

$$u_1(2\phi') = -\frac{ia_0}{2} \text{ sen}2\phi'. \quad (3.115)$$

Sustituyendo $u_0(2\phi')$ y $u_1(2\phi')$ en la Ec.(3.113) obtenemos para $u_2(2\phi')$ lo siguiente

$$u_2''(2\phi') = -A_2a_0 + a_0 \text{ sen}^22\phi', \quad (3.116)$$

usando la relación $\text{sen}^22\phi' = (1 - \cos 4\phi')/2$ esta ecuación puede reescribirse como

$$u_2''(2\phi') = -A_2a_0 + \frac{a_0}{2} (1 - \cos 4\phi'), \quad (3.117)$$

para asegurar la periodicidad de $u_2(2\phi')$, tomamos $A_2 = 1/2$. La función de onda obtenida después de resolver la Ec.(3.116) es

$$u(2\phi') = a_0 \left(1 - \frac{iQ}{2} \text{ sen}2\phi' + \frac{Q^2}{32} \cos 4\phi' + \dots \right). \quad (3.118)$$

A partir del valor de A_2 también podemos escribir la dependencia funcional de los estados propios A a primer orden como función de Q obteniéndose

$$A = \frac{1}{2}Q^2 + O(Q^3) + \dots \quad (3.119)$$

Existe otra manera para encontrar el espectro de energías A como función de Q , además esta forma tiene la ventaja de que nos da el espectro completo y no solo el caso de energías bajas. La manera de la que hablamos consiste en seguir un procedimiento similar al usado en el caso de campos eléctricos intensos. La diferencia principal es que ahora Q va multiplicada por la unidad imaginaria i . En este caso podemos seguir usando la teoría de Floquet y como consecuencia el espectro se obtiene de las Ecs.(3.92) y (3.93). Sin embargo, en este caso la relación de recurrencia para el determinante $\det(\Xi_r(0, a, q))$ se modifica, usándose ahora

$$\det(\Xi_r(0, a, q)) = \beta_{2r} \det(\Xi_{r-1}(0)) + \alpha_{2r} \beta_{2r} \det(\Xi_{r-2}(0)) + \alpha_{2r} \alpha_{2r-2}^2 \det(\Xi_{r-3}(0)), \quad (3.120)$$

donde $\alpha_{2r} = \gamma_{2r} \gamma_{2r-2}$ y $\beta_{2r} = 1 + \alpha_{2r}$.

La Fig.(3.4) muestra el espectro de energías resultante. El programa que se uso para dibujarlo(ver apéndice E), es el mismo que el usado en el caso de campos eléctricos débiles con la modificación en el determinante $\det(\Xi_r(0, a, q))$ expuesta. Las zonas delimitadas por las elipses externas determinan los valores permitidos de la energía, además nuevamente obtenemos bandas. En la misma gráfica presentamos las curvas de nivel que corresponden a una misma μ . Este resultado numérico puede compararse con el resultado teórico usando teoría de perturbaciones Ec.(3.119).

Para comparar la curva separatriz teórica y la curva numérica de transición en el origen, calculamos la curvatura de la curva teórica haciendo la segunda derivada de la Ec.(3.119). El resultado teórico es 1 para esta, mientras que el resultado numérico es 1.1.

Lo más importante a destacar de la Fig.(3.4) es que una banda de energía prohibida aparece cerca de la energía de Fermi ($\epsilon = 0$). Como se explica en la Fig.(3.5), donde se presenta una amplificación de la región alrededor del origen, dado un campo eléctrico, el valor mínimo ϵ es determinado por la curva separatriz. De hecho, puesto que la curva separatriz es $a \approx 2q^2$, haciendo uso de las Ecs.(3.104) y(3.105), obtenemos el mínimo valor permitido para ϵ ,

$$\epsilon \approx \pm \frac{\xi}{\sqrt{2}} \quad (3.121)$$

que produce una brecha de energía prohibida de tamaño

$$\Delta \approx \sqrt{2}\xi = \frac{\sqrt{2}ev_F E_0}{\omega}. \quad (3.122)$$

Estimemos esta cantidad, para un frecuencia $\omega = 50GHz$ y una intensidad de la onda electromagnética de $E_0 = 1V/m$, el tamaño de la brecha es $\Delta \approx 0.03meV$. Esta brecha de energía cae en el rango de las microndas donde las frecuencias van de los $300MHz$ a los $300GHz$, por ejemplo, una onda con $\omega = 100GHz$ lleva fotones con energías $E = 0.06meV$.

Incluimos ahora una comparación de la dependencias funcionales de los anchos de las brechas prohibidas con la amplitud de la radiación E_0 , que resultan de los dos métodos usados para resolver el problema planteado en este capítulo. La comparación tiene que hacerse bajo la siguiente consideración: en el método basado en la utilización de una transformación unitaria, se hizo la aproximación $p_y \ll p_x$ y

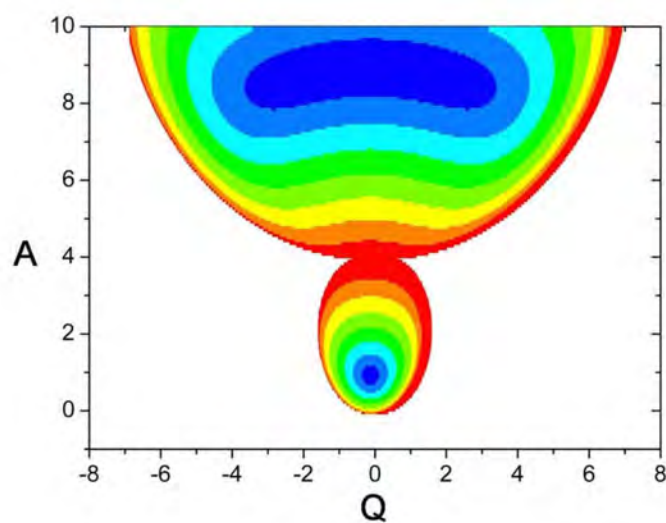


Figura 3.4: Espectro de energías para el caso de campos eléctricos débiles. Las zonas delimitadas por las elipses externas son regiones de energía permitidas. Las curvas de nivel denotan regiones con la misma μ . Además debe recordarse que $A = (2\epsilon/\hbar\omega)^2$ y $Q = 2\xi/\hbar\omega$.

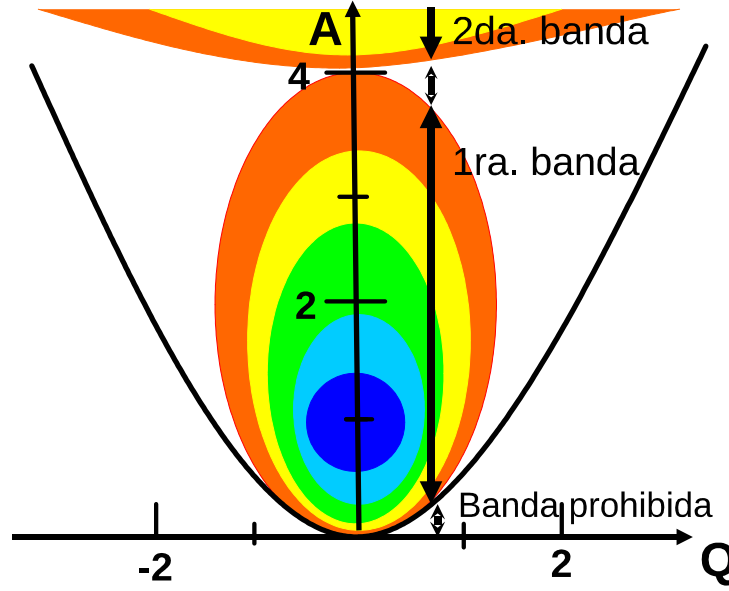


Figura 3.5: Amplificación del espectro de energías para el caso de campos eléctricos débiles cuando se está alrededor de $\epsilon = 0$. La figura muestra dos bandas prohibidas de energía cercanas a la energía de Fermi. La curva separatriz $A = Q^2/2$ obtenida por métodos perturbativos también es mostrada.

se usó un potencial vectorial \mathbf{A} con vector de polarización en la dirección de y . Mientras que en el método usado en esta sección, se hizo la aproximación $p_x \rightarrow 0$ tomando un potencial vectorial \mathbf{A} con vector de polarización en la dirección de x . Desde una perspectiva teórica ambas situaciones son equivalentes. Tomando en cuenta este precepto es válido hacer una comparación de los resultados obtenidos con ambos análisis. En el caso del método basado en la transformación unitaria se obtuvo que la dependencia del tamaño de la brecha para campos pequeños iba lineal con la amplitud de la onda Ec.(3.57). Comparando con el resultado dado por la Ec.(3.122) de esta sección, vemos que ambos métodos coinciden.

Es también importante mencionar una segunda predicción que se desprende de la Ec.(3.119). Podemos observar que el espectro se compone de elipses que van creciendo como se muestra en la Fig.(3.5). Vemos que para el intervalo en que $Q < 1.48$, el espectro tiene dos brechas, una alrededor de $A = 0$ y la otra en $A = 4$. Sin embargo, para $Q > 1.48$ la primera brecha desaparece. En esta situación la intensidad del campo está dado por

$$E_0 = \frac{1.48 (\hbar\omega^2)}{2ev_F}, \quad (3.123)$$

para un valor típico de la frecuencia de $\omega = 50GHz$, este valor corresponde a un campo $E_0 = 1.797V/m$.

Capítulo 4

Corriente electrónica en grafeno.

En el capítulo anterior introducimos el tema principal de esta tesis, consistente en el estudio de la interacción de partículas cargadas en grafeno con radiación electromagnética. Planteamos el modelo del problema suponiendo que la onda electromagnética se propogaba perpendicular a la muestra de nuestro material. Además, analizamos el espectro y las funciones propias para un par de situaciones experimentales, campos eléctricos fuertes y débiles. En el capítulo que iniciamos, continuaremos en este tenor. Analizaremos el mismo problema con una modificación. Esta consiste en introducir una onda de radiación que se propaga paralela al plano en que se mueven las cargas en la muestra de grafeno. Encontraremos el espectro de energías y las funciones de onda considerando el límite en que la energía de incidente de los fotones es mucho menor que dos veces la energía de los electrones en estado libre, es decir, $\hbar kc \ll 2\epsilon$. Con la función de onda encontrada, calcularemos la corriente producida en grafeno bajo campos electromagnéticos y veremos que esta tiene una fuerte dependencia no lineal con la frecuencia de la onda incidente y con la amplitud del campo de esta onda..

4.1. Función de onda

Para empezar esta sección, describamos el problema y el modelo que vamos a utilizar en este caso. Como se mencionó en la introducción de esta capítulo, vamos a estudiar un problema análogo al descrito en el capítulo anterior con la diferencia de que ahora la onda de radiación se propaga paralela a la red de grafeno como se muestra en la Fig.(4.1). En consecuencia, el potencial vectorial de campo electromagnético en unidades cgs esta dado por

$$\mathbf{A} = \frac{cE_0}{\omega} \cos(ky - \omega t) \hat{i}, \quad (4.1)$$

donde E_0 es la amplitud del campo electromagnético, ω es la frecuencia de la onda y c es la velocidad de la luz. La onda se propaga en dirección y y tiene vector de polarización en la dirección de x . La amplitud de la onda E_0 puede ser considerada constante debido a las mismas circunstancias expuestas en el capítulo precedente, esto es, que los efectos de apantallamiento son débiles en grafeno.

Los campos eléctrico y magnético a los que estan sometidos los electrones en este caso, se obtienen a partir del potencial vectorial \mathbf{A} , siendo en este caso los siguientes

$$\mathbf{E} = -E_0 \text{sen}(ky - \omega t) \hat{i} \quad (4.2)$$

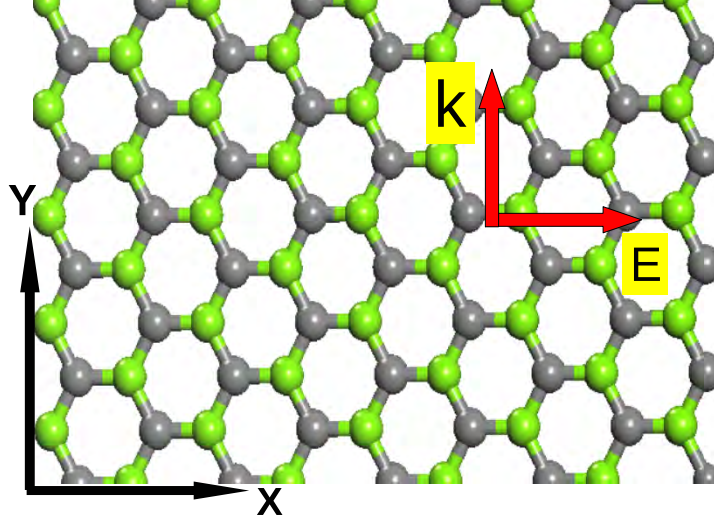


Figura 4.1: Red de grafeno. Se muestra el vector de onda \mathbf{k} que es la dirección en la que se propaga la onda de radiación y también la dirección de oscilación del campo eléctrico \mathbf{E} .

y

$$\mathbf{B} = \frac{cE_0k}{\omega} \text{sen}(ky - \omega t) \hat{\mathbf{k}}. \quad (4.3)$$

La ecuación que describe a los electrones bajo estas condiciones y que satisface el espinor

$$\Psi(x, y, t) = \begin{pmatrix} \Psi_A(x, y, t) \\ \Psi_B(x, y, t) \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

puede escribirse a partir de la siguiente ecuación de Dirac

$$H(x, y, t) \Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t}, \quad (4.5)$$

donde el Hamiltoniano está dado por

$$H(x, y, t) = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

con $\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c$, donde $\hat{\mathbf{p}}$ es el operador de momento. En la sección 3.1 del capítulo anterior, se encontró a partir de la ecuación de Dirac Ec.(4.5), en el caso de tener un potencial vectorial \mathbf{A} con vector de polarización en cualquier dirección y escrito en la norma de Coulomb, la Ec.(3.24) que reescribimos aquí por conveniencia

$$\left\{ -\hbar^2 \left[v_F^2 \nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] - 2i\hbar \frac{e}{c} v_F^2 (\mathbf{A} \cdot \nabla) + v_F^2 \left[\left(\frac{e}{c} \right)^2 A^2 - \frac{\hbar e}{c} \sigma_z \mathcal{B}_z \right] \right\} \Psi(x, y, t) \quad (4.7)$$

$$= -i\hbar v_F e (\sigma_x E_x + \sigma_y E_y) \Psi(x, y, t).$$

En el problema que estamos analizando ahora, el potencial vectorial \mathbf{A} dado por la Ec.(4.1), cumple con la condición de estar escrito en la norma de Coulomb. Por lo tanto, podemos usar esta Ec.(4.7) para resolver el problema a estudiar. Sustituyendo las expresiones de los campos eléctrico y magnético para este caso las Ecs.(4.2) y (4.3), obtenemos que $\Psi(x, y, t)$ satisface

$$\left\{ -\hbar^2 \left[v_F^2 \nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] - 2i\hbar v_F \xi \cos \phi \frac{\partial}{\partial x} + \xi^2 \cos^2 \phi - \hbar v_F k \xi \sigma_z \text{sen} \phi - i\hbar \omega \xi \sigma_x \text{sen} \phi \right\} \Psi(x, y, t) = 0, \quad (4.8)$$

donde en esta ecuación hemos definido la fase $\phi = ky - \omega t$ y

$$\xi = \frac{eE_0 v_F}{\omega} \quad (4.9)$$

como anteriormente lo habíamos hecho. Por completez, comparemos ahora esta ecuación con la del caso en que la onda de radiación incide de manera perpendicular a la muestra de grafeno Ec.(3.61),

$$\left\{ -\hbar^2 \left[v_F^2 \nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] - 2i\hbar v_F \xi \cos \phi \frac{\partial}{\partial x} + \xi^2 \cos^2 \phi - i\hbar \omega \xi \sigma_x \text{sen} \phi \right\} \Psi(x, y, t) = 0. \quad (4.10)$$

La diferencia fundamental entre las Ecs.(4.8) y (4.10) radica en que en el caso que estamos analizando el campo magnético si produce un efecto sobre las cargas en la muestra através del término $-\hbar v_F k \xi \sigma_z \text{sen} \phi$. Si este término fuera constante tal efecto consistiría en un producir un desdoblamiento de los niveles de energía debido al pseudoespín, el llamado efecto Zeeman. Al tener una dependencia armónica temporal este término produce que los eigenestados del problema roten de una manera muy particular con un ángulo que es función del $\cos \phi$, como se verá al realizar los cálculos.

Continuemos ahora con nuestro análisis. Para resolver la Ec.(4.8) proponemos una espinor solución con la siguiente forma

$$\Psi(x, y, t) = e^{ip_x x/\hbar + ip_y y/\hbar - i\epsilon/\hbar} \mathbf{F}(\phi), \quad (4.11)$$

donde

$$\epsilon = \pm v_F \sqrt{p_x^2 + p_y^2} = \pm v_F \|\mathbf{p}\| \quad (4.12)$$

y $\mathbf{F}(\phi)$ es también un espinor. Introduciendo esta solución en la Ec.(4.8) resulta la siguiente ecuación para $\mathbf{F}(\phi)$,

$$\begin{aligned} & -\hbar^2 (v_F^2 k^2 - \omega^2) \frac{d^2 \mathbf{F}(\phi)}{d^2 \phi} + 2i\hbar (\epsilon \omega - v_F^2 k p_y) \frac{d \mathbf{F}(\phi)}{d \phi} \\ & + [2v_F \xi p_x \cos \phi + \xi^2 \cos^2 \phi - \hbar v_F k \xi \sigma_z \text{sen} \phi - i\hbar \omega \xi \sigma_x \text{sen} \phi] \mathbf{F}(\phi) = 0. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Para ver como son las soluciones de este problema podemos usar una nueva solución de prueba

$$\mathbf{F}(\phi) = \exp(i\eta\phi/\hbar(v_F^2 k^2 - \omega^2)) \mathbf{z}(\phi), \quad (4.14)$$

donde $\mathbf{z}(\phi)$ es un espinor y hemos definido

$$\eta = \epsilon\omega - v_F^2 k p_y. \quad (4.15)$$

Sustituyendo el espinor de la Ec.(4.14) en la Ec.(4.13) obtenemos la siguiente ecuación para $\mathbf{z}(\phi)$

$$\mathbf{z}''(\phi) - \frac{1}{\hbar^2(v_F^2 k^2 - \omega^2)} \left(\frac{\eta^2}{\omega^2 - v_F^2 k^2} + 2v_F \xi p_x \cos\phi + \xi^2 \cos^2\phi - \hbar v_F k \xi \sigma_z \text{sen}\phi - i\hbar\omega \xi \sigma_x \text{sen}\phi \right) \mathbf{z}(\phi) = 0. \quad (4.16)$$

Debido a que $\omega = kc$ y usando las Ecs.(4.15) y (4.12), podemos escribir la ecuación anterior de la siguiente manera

$$\mathbf{z}''(\phi) - \frac{1}{(\hbar kc)^2(v_F^2/c^2 - 1)} \left(\frac{\epsilon^2(1 - (v_F/c)p_y/\|p\|)^2}{(1 - v_F^2/c^2)} + 2v_F \xi p_x \cos\phi + \xi^2 \cos^2\phi - \left(\frac{v_F}{c}\sigma_z + i\sigma_x\right) \hbar v_F e E_0 \text{sen}\phi \right) \mathbf{z}(\phi) = 0. \quad (4.17)$$

En esta ecuación todos los términos con $v_F/c \sim 1/300$ pueden ser despreciados en un primera aproximación, para obtener la siguiente ecuación

$$\mathbf{z}''(\phi) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} + \frac{1}{(\hbar\omega)^2} (\xi^2 \cos^2\phi + 2\xi v_F p_x \cos\phi - i\hbar\omega \xi \sigma_x \text{sen}\phi) \right\} \mathbf{z}(\phi) = 0. \quad (4.18)$$

Esta ecuación es en esencia igual a la Ec(3.65) que satisface el espinor $\mathbf{F}(\omega t)$, y que fue obtenida en el capítulo anterior para el caso en que la onda de radiación incide de manera perpendicular a la muestra de grafeno. La única diferencia se encuentra en que en aquel caso la ecuación diferencial tenía como variable ωt y en este la variable es $\phi = ky - \omega t$. El tratamiento para resolverla puede hacerse igual que antes, esto es, se pueden considerar los límites de campos eléctricos fuertes $\xi/\hbar\omega \gg 1$ y campos eléctricos débiles $\xi/\hbar\omega \ll 1$, como en las subsecciones 3.3.2 y 3.3.3 del capítulo anterior. Para el caso de campos magnéticos intensos las funciones serán las funciones de Mathieu, y los espectros obtenidos serán los de las Fig.(3.2) y(3.4) para los casos de campos fuertes y débiles respectivamente. En este capítulo queremos, además del espectro, calcular los efectos del campo electromagnético en la corriente. Ello requiere el cálculo de las funciones de onda. Sin embargo, las expresiones obtenidas en el capítulo anterior son demasiado complicadas. Por ello, para avanzar un poco más en el análisis del problema planteado, procederemos a estudiar una aproximación que vuelva al problema mas tratable pero conservando el interés desde el punto de vista experimental. Así pues, se intentará obtener una expresión analítica de las funciones de onda mediante una aproximación conveniente. Tales funciones propias serán usadas después en el cálculo de la corriente eléctrica en la muestra de grafeno.

Empezamos notando que la Ec.(4.13) se puede escribirse de la siguiente manera usando las expresión explícita de ξ y la relación $\omega = kc$,

$$\begin{aligned}
& -\hbar^2 k^2 (v_F^2 - c^2) \frac{d^2 \mathbf{F}(\phi)}{d^2 \phi} + 2i\hbar k (\epsilon c - v_F^2 p_y) \frac{d\mathbf{F}(\phi)}{d\phi} + \\
& + \left[2 \frac{v_F^2 e E_0 p_x}{kc} \cos \phi + \frac{(e E_0 v_F)^2}{k^2 c^2} \cos^2 \phi - \frac{\hbar v_F^2 e E_0}{c} \sigma_z \text{sen} \phi - i\hbar v_F e E_0 \sigma_x \text{sen} \phi \right] \mathbf{F}(\phi) = 0,
\end{aligned} \tag{4.19}$$

dividendo todos los términos por $2\hbar k (\epsilon c - v_F^2 p_y)$ obtenemos la siguiente ecuación

$$\begin{aligned}
& \frac{-\hbar k (v_F^2 - c^2) d^2 \mathbf{F}(\phi)}{2(\epsilon c - v_F^2 p_y) d^2 \phi} + i \frac{d\mathbf{F}(\phi)}{d\phi} \\
& + \frac{1}{2\hbar k (\epsilon c - v_F^2 p_y)} \left[2 \frac{v_F^2 e E_0 p_x}{kc} \cos \phi + \frac{(e E_0 v_F)^2}{k^2 c^2} \cos^2 \phi - \frac{\hbar v_F^2 e E_0}{c} \sigma_z \text{sen} \phi - i\hbar v_F e E_0 \sigma_x \text{sen} \phi \right] \mathbf{F}(\phi) = 0.
\end{aligned} \tag{4.20}$$

Esta ecuación es una ecuación de segundo orden, entonces tiene dos soluciones. Para encontrar la primera de soluciones utilizamos el procedimiento descrito en la referencia [106], despreciando la segunda derivada en la Ec.(4.20). Para ello deben tomarse en cuenta dos condiciones. La primera de ellas es que el coeficiente de la segunda derivada sea pequeño, es decir,

$$\frac{-\hbar k (v_F^2 - c^2)}{2(\epsilon c - v_F^2 p_y)} = \frac{-\hbar k c ((v_F/c)^2 - 1)}{2\epsilon (1 - (v_F/c) p_y / \|p\|)} \sim \frac{\hbar k c}{2\epsilon} \ll 1, \tag{4.21}$$

donde en el último paso se tomó en cuenta que $v_F/c \sim 1/300$. La condición dada por (4.21) tiene un significado físico claro, dado que $\hbar k c$ es la energía de un fotón. Así, la energía de los fotones debe de ser menor que dos veces la energía de los electrones en estado libre ϵ . Al mismo tiempo, esta es una condición de autoconsistencia, dado que en caso contrario, habría que tomar en cuenta los efectos de cuantización del campo electromagnético.

La segunda condición, también muy importante, es que el término sin derivadas de la ecuación diferencial (4.20) dado por

$$\frac{1}{2\hbar k (\epsilon c - v_F^2 p_y)} \left[2 \frac{v_F^2 e E_0 p_x}{kc} \cos \phi + \frac{(e E_0 v_F)^2}{k^2 c^2} \cos^2 \phi - \frac{\hbar v_F^2 e E_0}{c} \sigma_z \text{sen} \phi - i\hbar v_F e E_0 \sigma_x \text{sen} \phi \right] \tag{4.22}$$

también sea pequeño. En este término, cuando se considera el caso de que la muestra es pequeña en comparación con la longitud de onda de la onda de radiación incidente, el coeficiente más grande es

$$\frac{(e E_0 v_F)^2}{k^2 c^2}. \tag{4.23}$$

Por lo tanto, que sea pequeño significa que

$$e E_0 v_F \ll kc, \tag{4.24}$$

si multiplicamos por \hbar esta relación obtenemos la condición,

$$\hbar e E_0 v_F \ll \hbar kc \tag{4.25}$$

la cual se satisface para campos eléctricos pequeños.

Teniendo en mente estas condiciones, la ecuación diferencial simplificada a resolver es,

$$\frac{d\mathbf{F}(\phi)}{d\phi} + \frac{1}{2i\hbar(\epsilon c - v_F^2 p_y)} \left[2\frac{v_F^2 e E_0 p_x}{k c} \cos \phi + \frac{(e E_0 v_F)^2}{k^2 c^2} \cos^2 \phi - \left(\frac{v_F}{c} \sigma_z + i \sigma_x \right) \hbar v_F e E_0 \text{sen} \phi \right] \mathbf{F}(\phi) = 0. \quad (4.26)$$

Volviendo a introducir $\omega = kc$, el parámetro ξ y usando la definición de η , en la Ec(4.26) esta puede escribirse como

$$\frac{d\mathbf{F}(\phi)}{d\phi} + \frac{1}{2i\hbar\eta} [2\xi v_F p_x \cos \phi + \xi^2 \cos^2 \phi - (v_F k \sigma_z + i\omega \sigma_x) \hbar \xi \text{sen} \phi] \mathbf{F}(\phi) = 0. \quad (4.27)$$

Ahora bien, usando la relación $\cos^2 \phi = 1/2(1 + \cos 2\phi)$ obtenemos finalmente,

$$2i\hbar\eta \frac{d\mathbf{F}(\phi)}{d\phi} + \left[2\xi v_F p_x \cos \phi + \frac{\xi^2}{2} (1 + \cos 2\phi) + (\hbar v_F k \sigma_z + i\hbar\omega \sigma_x) \xi \text{sen} \phi \right] \mathbf{F}(\phi) = 0. \quad (4.28)$$

La solución de esta ecuación tiene la siguiente forma

$$\mathbf{F}(\phi) = \exp[G(\phi)] \mathbf{u}, \quad (4.29)$$

donde \mathbf{u} es un espinor que será encontrado posteriormente y

$$G(\phi) = \frac{i\xi^2}{4\hbar\eta} + \frac{i\xi v_F p_x}{\hbar\eta} \text{sen} \phi + \frac{i\xi^2}{8\hbar\eta} \text{sen} 2\phi - \frac{i\xi v_F k}{2\eta} \sigma_z \cos \phi - \frac{\xi\omega}{2\eta} \sigma_x \cos \phi. \quad (4.30)$$

Aquí puede verse claramente el efecto del campo magnético sobre los estados propios del sistema a través del término

$$R(\phi) = \exp\left(-\frac{i\xi v_F k}{2\eta} \sigma_z \cos \phi\right), \quad (4.31)$$

el cual produce que los eigenestados roten alrededor del eje z por un ángulo $(\xi v_F k \cos \phi)/\eta$.

Para encontrar la segunda solución de la Ec.(4.20), seguimos usando el procedimiento descrito en la referencia [106]. Tal proceso nos lleva a despreciar $\mathbf{F}(\phi)$ en la ecuación diferencial (4.20) en el límite en que $\phi \rightarrow 0$. Esto puesto que en ese límite $\mathbf{F}(\phi)$ es más pequeño que $\mathbf{F}'(\phi)$, luego entonces, para obtener esta solución debemos resolver la ecuación

$$\frac{d^2 \mathbf{F}(\phi)}{d^2 \phi} - i \frac{2(\epsilon c - v_F^2 p_y)}{\hbar k (v_F^2 - c^2)} \frac{d\mathbf{F}(\phi)}{d\phi} = 0. \quad (4.32)$$

La solución de esta ecuación es

$$\mathbf{F}(\phi) = \frac{-i\hbar k (v_F^2 - c^2)}{2(\epsilon c - v_F^2 p_y)} \exp\left(i \frac{2(\epsilon c - v_F^2 p_y)}{\hbar k (v_F^2 - c^2)} \phi\right) \mathbf{u}, \quad (4.33)$$

donde \mathbf{u} es un espinor que se obtiene de condiciones de frontera. Esta solución tiene una característica muy importante, debido a la aproximación descrita por la Ec.(4.21) su amplitud es muy pequeña, por

lo tanto, podemos despreciarla. Como consecuencia, la solución de la Ec.(4.8) puede escribirse usando unicamente la primera solución de la Ec.(4.20) definida en la Ec.(4.29) para obtener

$$\Psi(x, y, t) = \exp(ip_x x/\hbar + ip_y y/\hbar - i\epsilon/\hbar) \exp[G(\phi)] \mathbf{u}, \quad (4.34)$$

donde el espinor \mathbf{u} se obtiene de la siguiente manera. Sabemos que en el caso de que el efecto del campo de radiación tienda a cero, es decir, en el caso en que $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{0}$, $\Psi(x, y, t)$ tiene que ser la solución de la ecuación de Dirac para una partícula libre, para evitar soluciones extrañas. Considerando este hecho, \mathbf{u} esta dado por (ver apéndice C)

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad \tan \theta = \left(\frac{p_y}{p_x} \right), \quad (4.35)$$

donde como ya hemos mencionado en reiteradas ocasiones, el signo más se refiere a electrones y el menos a huecos.

Para obtener el espinor que es la solución final de la Ec.(4.8), falta considerar que el Hamiltoniano de la Ec.(4.6) es periódico en el tiempo debido a que la onda electromagnética incidente tiene periodicidad temporal y su periodo es $T = 2\pi/\omega$. Tomando en cuenta esto, la solución de nuestro problema tendrá que escribirse de la siguiente manera

$$\Psi(x, y, t) = \exp(-i\chi t/\hbar) \Phi(x, y, t), \quad (4.36)$$

donde $\Phi(x, y, t)$ es una función periódica en el tiempo, es decir, $\Phi(x, y, t) = \Phi(x, y, t + T)$ y χ es un parámetro real único salvo por multiples de $\hbar\omega$. Las propiedades anteriores son consecuencia del formalismo de Floquet (ver apéndice D) que fue desarrollado para estudiar campos dependientes del tiempo y que en general abarca todos los operadores lineales que tengan algún tipo de periodicidad. Nuestra solución Ec.(4.34) tiene la forma requerida Ec.(4.36), reescribamosla para verlo

$$\Psi(x, y, t) = \exp\left[-i\left(\epsilon + \frac{\xi^2\omega}{4\eta}\right)\frac{t}{\hbar}\right] \Phi(x, y, t) = e^{-iEt/\hbar} \Phi(x, y, t), \quad (4.37)$$

donde

$$E = \epsilon + \frac{\xi^2\omega}{4\eta} \quad (4.38)$$

y los espinores $\Phi(x, y, t)$ (llamados modos de Floquet), que satisfacen la siguiente ecuación de valores propios

$$\left[H(x, y, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Phi(x, y, t) = E\Phi(x, y, t). \quad (4.39)$$

pueden escribirse de la siguiente manera

$$\Phi(x, y, t) = \exp\left[i\left(\frac{\xi^2 k}{4\eta} + p_x \right) \frac{x}{\hbar} + ip_y y/\hbar \right] \exp[F(\phi)] \mathbf{u}, \quad (4.40)$$

con

$$F(\phi) = \frac{i\xi v_F p_x}{\hbar\eta} \text{sen}\phi + \frac{i\xi^2}{8\hbar\eta} \text{sen}2\phi - \frac{i\xi v_F k}{2\eta} \sigma_z \cos\phi - \frac{\xi\omega}{2\eta} \sigma_x \cos\phi. \quad (4.41)$$

Sin embargo, falta considerar un aspecto importante y este es que los modos de Floquet no son únicos pues

$$\Phi(x, y, t) = \exp(in\omega t) \Phi(x, y, t) \equiv \Phi_n(x, y, t), \quad (4.42)$$

con n un número entero $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ es una solución equivalente a la expresada en la Ec.(4.37), con la salvedad de que las energías se modifican de la siguiente manera

$$E \rightarrow E_n = n\hbar\omega + \epsilon + \frac{\xi^2\omega}{4\eta}. \quad (4.43)$$

Una conclusión importante que se obtiene apartir de esta relación, es que la periodicidad de los campos de radiación a los que esta expuesta la muestra de grafeno produce bandas de energía. Las soluciones finales de nuestro problema son, por lo tanto,

$$\Psi_n(x, y, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(x, y, t) \quad (4.44)$$

con el modo Floquet $\Phi_n(x, y, t)$ dado por la Ec.(4.42).

Analicemos un poco más el espectro de energías. Reescribiendo la ecuación de valores propios de la energía Ec.(4.43) tomando en cuenta las expresiones para ϵ , η y ξ dadas por las Ecs.(4.12), (4.15) y (4.9) respectivamente, obtenemos

$$E_n(\mathbf{p}) = n\hbar\omega \pm v_F \|\mathbf{p}\| \pm \frac{e^2 E_0^2 v_F}{4\omega^2 \|\mathbf{p}\| \left(1 - \frac{v_F k p_y}{\omega \|\mathbf{p}\|}\right)}, \quad (4.45)$$

en esta relación observamos claramente otro efecto importante del campo de radiación y es que produce un doblamiento de las bandas debido al último término de la ecuación anterior. Otra consideración que es necesario apuntar es que este espectro solo es válido cuando se satisface las condiciones determinadas por las Ecs.(4.21) y (4.25), que pueden escribirse como una sola condición de la siguiente manera

$$\hbar e E_0 v_F \ll \hbar k c \ll 2\epsilon, \quad (4.46)$$

Vemos que el espectro es válido incluso para puntos cercanos al punto de Dirac, pues siempre podemos tomar fotones con vectores de onda k tan pequeños como sea posible.

4.2. Cálculo de corriente.

En esta sección calcularemos la corriente electrónica en grafeno $\mathbf{j}(t)$, usando para ello la solución obtenida para el problema descrito en la sección anterior dada por la Ec.(4.44), tomando en cuenta una aproximación. La aproximación se hará en la solución usada y consistirá en despreciar la exponencial que proviene del efecto del campo magnético Ec.(4.31). Como puede verse de la siguiente expresión

$$\exp\left[-\frac{i\xi v_F k}{2\eta} \sigma_z \cos \phi - \frac{\xi\omega}{2\eta} \sigma_x \cos \phi\right] = \exp\left[\left(-i\frac{v_F}{c} \sigma_z - \sigma_x\right) \frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right] \quad (4.47)$$

obtenida de una de las partes que constituyen el modo de Floquet Ec.(4.40), y donde la primera exponencial cuyo exponente es proporcional a v_F/c es el término correspondiente al efecto del campo magnético y la otra exponencial es debida al campo eléctrico. Se tiene que la rotación producida por el campo magnético es $v_F/c \sim 1/300$ más chica que el efecto de campo eléctrico en el espinor solución. Por lo tanto,

en los cálculos que realizaremos en este capítulo despreciaremos esa exponencial y usaremos la siguiente función de onda

$$\Psi_n(x, y, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(x, y, t), \quad (4.48)$$

donde

$$E_n(\mathbf{p}) = n\hbar\omega + \epsilon + \frac{\xi^2\omega}{4\eta}. \quad (4.49)$$

y el modo de Floquet es

$$\Phi_n(x, y, t) = \exp \left[in\omega t + i \left(\frac{\xi^2 k}{4\eta} + p_x \right) \frac{x}{\hbar} + ip_y y/\hbar \right] \exp [F_1(\phi)] \mathbf{u}, \quad (4.50)$$

con

$$F_1(\phi) = \frac{i\xi v_F p_x}{\hbar\eta} \text{sen}\phi + \frac{i\xi^2}{8\hbar\eta} \text{sen}2\phi - \frac{\xi\omega}{2\eta} \sigma_x \cos\phi. \quad (4.51)$$

Empecemos con el cálculo de la corriente $\mathbf{j}(t)$. Deacuerdo a la mecánica estadística, la expresión para la corriente electrónica en grafeno es

$$\mathbf{j}(t) = \frac{4}{A} \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{j}_{\mathbf{p}}(t) f_{\mathbf{p}}(t), \quad (4.52)$$

donde A^{-1} es el área de la muestra, $f_{\mathbf{p}}(t)$ es la función de distribución, $\mathbf{j}_{\mathbf{p}}(t)$ es la densidad de corriente para partículas con momento \mathbf{p} a un tiempo t y el factor 4 proviene de la degeneración debida al número de espines y de valles. De la forma de esta expresión vemos inmediatamente que para realizar el cálculo son necesarios dos ingredientes. El primero es la función de distribución $f_p(t)$ que puede obtenerse usando la ecuación de Boltzmann sin colisiones en el límite en que se desprecian las transiciones interbanda. Es importante notar que este procedimiento da exactamente los mismos resultados que considerar la velocidad de los electrones como dependiente del tiempo mientras que se toma la función de distribución estática [66]. Esta equivalencia es producto del hecho trivial de que en un tratamiento tipo Boltzmann, el campo eléctrico induce un desplazamiento de la superficie de Fermi. La función de distribución que usaremos en consecuencia será

$$f_p(t) = \frac{1}{1 + \exp[(E_n(\mathbf{p}) - \epsilon_F)/k_B T]}, \quad (4.53)$$

donde $\epsilon_F = v_F \|p_F\|$ es la energía de Fermi y $E_n(\mathbf{p})$ esta dada por la Ec.(4.49).

El segundo ingrediente para el cálculo de la corriente es obtener la densidad de corriente $\mathbf{j}_{\mathbf{p}}(t)$ que es trivial de calcular conociendo la forma del espinor solución Ec.(4.48). Puesto que la componente i ($i = x, y$), del vector densidad de corriente, esta dada por

$$j_{i,\mathbf{p}}(t) = ev_F \Psi_n^*(x, y, t) \sigma_i \Psi_n(x, y, t), \quad (4.54)$$

usando la función de onda referida Ec.(4.48), obtenemos las siguiente expresión para las componente de $\mathbf{j}_{\mathbf{p}}(t)$ en la dirección x ,

$$j_{x,\mathbf{p}}(t) = \mathbf{u}^\dagger D_x^\dagger(\phi) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} D_x(\phi) \mathbf{u}, \quad (4.55)$$

donde

$$D_x(\phi) = \begin{pmatrix} \cosh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) & \sinh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) \\ \sinh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) & \cosh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) \end{pmatrix}, \quad (4.56)$$

y el espinor \mathbf{u} es el expresado en la Ec.(4.35). Continuando con el cálculo se obtiene

$$j_{x,\mathbf{p}}(t) = \mathbf{u}^\dagger \begin{pmatrix} \cosh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) & \sinh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) \\ \sinh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) & \cosh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sinh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) & \cosh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) \\ \cosh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) & \sinh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) \end{pmatrix} \mathbf{u}, \quad (4.57)$$

$$j_{x,\mathbf{p}}(t) = \mathbf{u}^\dagger \begin{pmatrix} \cosh\left(\frac{\xi\omega}{\eta} \cos \phi\right) & \sinh\left(\frac{\xi\omega}{\eta} \cos \phi\right) \\ \sinh\left(\frac{\xi\omega}{\eta} \cos \phi\right) & \cosh\left(\frac{\xi\omega}{\eta} \cos \phi\right) \end{pmatrix} \mathbf{u}, \quad (4.58)$$

finalmente, usando el espinor \mathbf{u} dado por la Ec.(4.35), queda la siguiente expresión para la corriente en la dirección x ,

$$j_{x,\mathbf{p}}(t) = ev_F \left[\sinh\left(\frac{\xi\omega}{\eta} \cos \phi\right) + \cosh\left(\frac{\xi\omega}{\eta} \cos \phi\right) \cos \theta \right]. \quad (4.59)$$

Para determinar la corriente en la dirección y seguimos un procedimiento igual al usado para calcular la corriente $j_{x,\mathbf{p}}(t)$. Usando el espinor solución de la Ec.(4.48) obtenemos

$$j_{y,\mathbf{p}}(t) = \mathbf{u}^\dagger D_x^\dagger(\phi) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} D_x(\phi) \mathbf{u},$$

donde $D_x(\phi)$ esta dado por la Ec.(4.56) y u es el espinor solución del caso de partícula libre Ec.(4.35), se sigue entonces

$$j_{y,\mathbf{p}}(t) = \mathbf{u}^\dagger \begin{pmatrix} \cosh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) & \sinh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) \\ \sinh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) & \cosh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i \sinh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) & -i \cosh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) \\ i \cosh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) & i \sinh\left(\frac{\xi\omega}{2\eta} \cos \phi\right) \end{pmatrix} \mathbf{u}, \quad (4.60)$$

$$j_{y,\mathbf{p}}(t) = \mathbf{u}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \mathbf{u}$$

$$j_{y,\mathbf{p}}(t) = ev_F \sinh \theta, \quad (4.61)$$

Observamos inmediatamente que la componente x de la corriente Ec.(4.59) tiene un comportamiento fuertemente no lineal. De hecho se puede reescribir usando el desarrollo de Fourier para las funciones hiperbólicas [107]

$$j_{x,\mathbf{p}}(t) = ev_F \sum_{s=0}^{\infty} J_{2s+1}\left(\frac{\xi\omega}{\eta}\right) \cos[(2s+1)\phi] + ev_F \left[J_0\left(\frac{\xi\omega}{\eta}\right) + 2 \sum_{s=1}^{\infty} J_{2s}\left(\frac{\xi\omega}{\eta}\right) \cos[2s\phi] \right] \cos \theta, \quad (4.62)$$

donde $J_s(\xi\omega/\eta)$ son las funciones de Bessel.

Podemos ahora si calcular la corriente en grafeno con ayuda de las Ecs.(4.52), (4.53), (4.61) y (4.62). Obtenemos inmediatamente que en el límite termodinámico (que consiste en sumar sobre todas las posibles direcciones del momento) $j_{y,\mathbf{p}}(t) = 0$, mientras para $j_{x,\mathbf{p}}(t)$ se obtiene

$$j_{x,\mathbf{p}}(t) = \frac{4ev_F}{(2\pi\hbar)^2} \sum_{s=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} J_{2s+1}\left(\frac{\xi\omega}{\eta}\right) f_{\mathbf{p}}(t) dp_x dp_y \cos[(2s+1)\phi] \quad (4.63)$$

debido a que el término con los armónicos pares se cancela al hacer la integral del $\cos\theta$ sobre todo el espacio de momentos. Escribamos esta ecuación en la siguiente forma

$$j_{x,\mathbf{p}}(t) = \frac{4ev_F}{(2\pi\hbar)^2} \sum_{s=0}^{\infty} A(s) \cos[(2s+1)\phi] \quad (4.64)$$

donde hemos definido

$$A(s) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} J_{2s+1}\left(\frac{\xi\omega}{\eta}\right) f_{\mathbf{p}}(t) dp_x dp_y \quad (4.65)$$

si consideramos el límite $\epsilon_F \gg k_B T$, entonces en el caso $n = 0$ podemos reemplazar $f_{\mathbf{p}}(t)$ por la función escalón $\Theta(\epsilon + \xi^2\omega/4\eta - \epsilon_F)$ para obtener

$$A(s) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} J_{2s+1}\left(\frac{\xi\omega}{\eta}\right) \Theta\left(\epsilon + \frac{\xi^2\omega}{4\eta} - \epsilon_F\right) dp_x dp_y \quad (4.66)$$

De la Ec.(4.15) vemos que el factor η puede aproximarse de la siguiente manera

$$\eta = \omega v_F \|\mathbf{p}\| \left(1 - \frac{v_F k p_y}{\omega \|\mathbf{p}\|}\right) \sim \omega v_F \|\mathbf{p}\| = \omega \epsilon, \quad (4.67)$$

ya que

$$\frac{v_F k p_y}{\omega \|\mathbf{p}\|} = \frac{v_F p_y}{c \|\mathbf{p}\|} \propto \frac{v_F}{c} \sim \frac{1}{300}. \quad (4.68)$$

Usando esta aproximación, $A(s)$ puede escribirse como

$$A(s) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} J_{2s+1}\left(\frac{\xi}{\epsilon}\right) \Theta\left(\epsilon + \frac{\xi^2}{4\epsilon} - \epsilon_F\right) dp_x dp_y. \quad (4.69)$$

Para calcular esta integral cambiemos a coordenadas polares, en tal caso

$$A(s) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\epsilon_F \alpha / v_F} J_{2s+1}\left(\frac{\xi}{v_F p}\right) p dp d\theta, \quad (4.70)$$

donde

$$\alpha = \left[\frac{1 + \sqrt{1 - Q_0^2}}{2} \right], \quad (4.71)$$

con

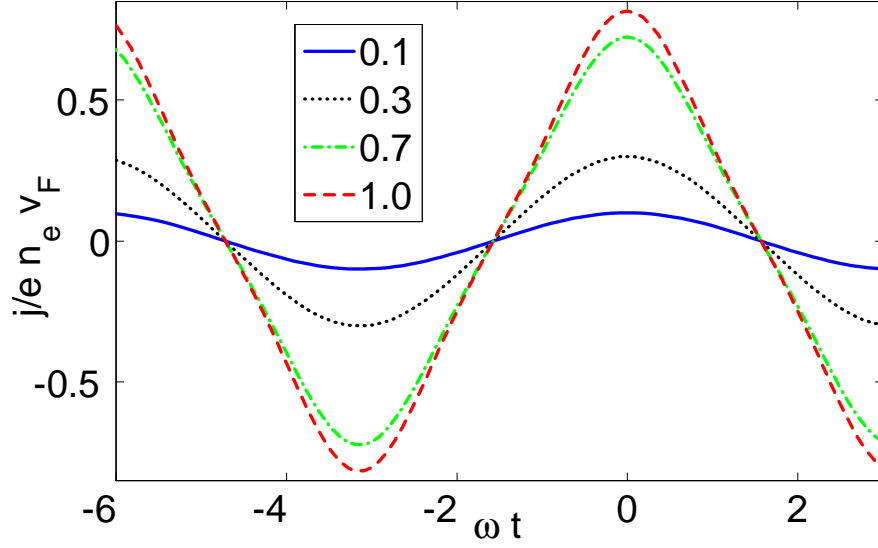


Figura 4.2: Dependencia con ωt de la corriente j_x , medida en unidades de $e n_e v_F$. Las diferentes curvas se determinan por diferentes valores del parámetro $Q_0 = eE_0/\omega p_F$.

$$Q_0 = \frac{\xi}{\epsilon_F} = \frac{eE_0}{\omega p_F}$$

y hemos usado $\epsilon_F = v_F \|\mathbf{p}_F\| \equiv v_F p_F$. Si ahora hacemos el cambio de variable

$$p = \frac{\epsilon_F}{v_F} \zeta, \quad (4.72)$$

e integramos la variable angular obtenemos

$$A(s) = 2\pi p_F^2 \alpha^2 \int_0^1 J_{2s+1} \left(\frac{Q_0}{\alpha \zeta} \right) \zeta d\zeta. \quad (4.73)$$

Esta integral se obtiene de tablas, por ejemplo, de la Ref.([107]). En el caso de $s = 0$ encontramos

$$A(0) = \pi p_F^2 \alpha Q_0 \left[1 + \frac{1}{8} \left(\frac{Q_0}{\alpha} \right)^2 - \frac{1}{576} \left(\frac{Q_0}{\alpha} \right)^4 + \dots \right]. \quad (4.74)$$

Para $s > 0$, la integral puede aproximarse de la siguiente manera

$$A(s) = 2\pi p_F^2 \left(\frac{Q_0}{\alpha} \right)^3 \frac{\Gamma(s - 1/2)}{\Gamma(s + 5/2)}. \quad (4.75)$$

Los primeros términos de la corriente son

$$j_x(t) = en_e v_F Q_0 \left\{ \left(1 - \frac{1}{8} Q_0^2\right) \cos \phi + \frac{2}{15} Q_0^2 \cos 3\phi + \dots \right\} \quad (4.76)$$

donde n_e es la densidad de electrones $n_e = p_F^2/\pi\hbar^2$ y hay que recordar que $\phi = ky - \omega t$. La corriente para el límite de longitudes de onda muy grandes ($\lambda \rightarrow \infty$) tiene la siguiente dependencia funcional con la frecuencia.

$$j_x(t) = en_e v_F Q_0 \left\{ \left(1 - \frac{1}{8} Q_0^2\right) \cos \omega t + \frac{2}{15} Q_0^2 \cos 3\omega t + \dots \right\} \quad (4.77)$$

En la Fig.(4.2) se muestra la corriente como función de ωt , para distintos valores de Q_0 . En esta corriente se puede observar un comportamiento no lineal con la amplitud del campo aplicado, ya que, las potencias de $Q_0 = eE_0/\omega p_F$ van aumentando en el desarrollo. El resultado obtenido es igual al obtenido por S. A. Mikhailov en el año de 2007 [108], con la diferencia de que el investigador mencionado uso un tratamiento semiclásico en su trabajo. En nuestro cálculo nosotros usamos un procedimiento completamente cuántico lo que de un gran valor a nuestro trabajo. Además este resultado reproduce la conductividad intrabanda de Drude en límite en que no hay colisiones en la red

$$\sigma(\omega) = \frac{in_e e^2 v_F}{\omega p_F} = \frac{ie^2 \epsilon_F}{\pi \hbar \hbar \omega}. \quad (4.78)$$

Otro aspecto muy significativo que se deduce del resultado obtenido es el siguiente: el grafeno toma una señal de entrada de una frecuencia determinada y genera una señal de salida con una frecuencia que es un múltiplo impar de la frecuencia original. Esta propiedad es muy importante para la construcción de unos dispositivos electrónicos conocidos como multiplicadores de frecuencia. Estos dispositivos permiten, por ejemplo, que instrumentos de comunicación transmitan datos mucho más rápido. En el año de 2009 como una comprobación a nuestras ideas, la materialización de este dispositivo fue posible debido a que en el Instituto Tecnológico de Massachusetts los profesores T. Palacios y J. Kong junto con dos de sus estudiantes, lograron producir el primer multiplicador de frecuencia experimental [109]. En el trabajo mencionado se uso un circuito electrónico muy simple, formado básicamente por el multiplicador de frecuencia y el generador de la señal de entrada. Con tal circuito lograron que una muestra de grafeno generara una onda de salida con una frecuencia del doble de la frecuencia original. Además de esto, otro hecho importante, que es de resaltar, es que la señal de salida presentó una pureza espectral muy buena aun sin ser filtrada, cosa que no sucede con los actuales multiplicadores los cuales necesitan componentes adicionales para filtrar las frecuencias útiles [110].

Capítulo 5

Conclusiones y perspectivas.

1) La parte medular de esta tesis consistió en estudiar a las partículas cargadas en grafeno interactuando con radiación electromagnética. Para modelar esta interacción se usó el acoplamiento mínimo o sustitución de Peierls sustituyendo en el Hamiltoniano de Dirac los operadores de momento $\hat{\mathbf{p}}$ por los operadores $\hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c$ que contienen el efecto de la onda de radiación. En una primera instancia se consideró una muestra de grafeno irradiada perpendicularmente.

2) La ecuación obtenida se resolvió usando dos métodos, el primero de ellos se basó en usar una transformación unitaria y el segundo en usar una función de onda de prueba como espinor solución. El espectro de energías resultado de ambos métodos presentó bandas permitidas y prohibidas de energía. Con el segundo método fue posible encontrar los estados propios del problema.

3) En la energía de Fermi, el ancho de la banda prohibida crece linealmente con la amplitud de la onda de radiación. Esto fué obtenido tanto con el método de la transformación unitaria así como con el de la función de onda de prueba, considerando en este último el límite de campos eléctricos débiles.

4) Usando el método de la solución de prueba en el límite de campos eléctricos fuertes, se encontró que las funciones de onda estan compuestas de dos partes, una una onda plana y la otra un espinor solución a la ecuación de Mathieu. El espectro de energía encontrado fue el de las lenguas de Mathieu. Este espectro exhibe bandas permitidas y prohibidas de energía.

5) Usando el método de la solución de prueba en el límite de campos eléctricos débiles, se encontró que el espectro estaba compuesto por una serie de elipses concentricas y cerca de la energía de Fermi, se abre una brecha prohibida que tiene una dependencia lineal con la amplitud de la onda de radiación.

6) En el último capítulo de esta tesis se abordó el mismo problema de la interacción de cargas en grafeno interactuando con radiación electromagnética, pero con una modificación que consistió, en considerar a la onda electromagnética viajando paralela a la dirección de movimiento de los electrones en la muestra de grafeno. Se encontraron las funciones de onda y el espectro para este caso. Con estas funciones de onda y espectro se calculo la corriente eléctrica.

7) La corriente eléctrica calculada es altamente no lineal, entendiéndose con esto que al aplicar una

onda con una determinada frecuencia el grafeno produce armónicos de mayor frecuencia. Esta corriente contiene solo armónicos impares y en el límite de respuesta lineal reproduce el resultado para la conductividad intrabanda de Drude.

Todas estas propiedades encontradas durante la elaboración de la presente tesis, son sin duda muy interesantes para la "electrónica" del grafeno. Finalizaremos dando algunas interrogantes y perspectivas que dejan abiertas este trabajo. Por ejemplo, podría realizarse el estudio mencionado en el capítulo 2 de esta tesis, donde planteamos una de las principales motivaciones para comenzar la investigación realizada en esta tesis fue el estudio de electrones en cristales bidimensionales sujetos a radiación y campos magnéticos constantes. Mencionamos también que a este respecto, a principios del siglo veinte se reportaron estudios experimentales donde se mencionaba la aparición de estados de resistencia cero en muestras de $GaAs/Al_xGa_{1-x}$. Nosotros en un principio nos planteamos la pregunta de que sería lo que sucedería al grafeno en estas mismas condiciones. Al comenzar este estudio, encontramos que no había sido resuelto el caso de radiación electromagnética incidiendo en grafeno. Así, primero se resolvió este problema. Lamentablemente, al considerar un campo magnético junto con un campo de radiación en nuestro problema, este se complicaba bastante y por lo tanto, era difícil encontrar una solución analítica y finalmente queda como un tema de investigación a realizar.

En el capítulo 3 planteamos otro problema interesante, el cual también sería un buen objeto de estudio. El problema que mencionamos, es considerar el campo eléctrico inducido por la radiación y que se debe a la corriente dependiente del tiempo, que en el caso de campo paralelo a la muestra calculamos en el capítulo 4. Lo que sería interesante de este estudio, es que a densidades experimentales relevantes, este campo tiene un impacto notable sobre las cargas en grafeno y en consecuencia sería una manera de complementar este trabajo.

A partir de este estudio se puede plantear el problema experimental de estudiar si las bandas prohibidas obtenidas por efecto del campo de radiación afectan las propiedades de tunelaje de los electrones en la muestra de grafeno o no. Esto puesto que en presencia de un campo variable la relación de energía momento pierde sentido. Un análisis óptico de los espectros es otro estudio experimental que podría abarcarse, sobre todo para saber si en las zonas prohibidas de energía hay procesos de absorción o reflexión de fotones.

Apéndice A

Ecuación de Dirac

La ecuación de Dirac surge de la necesidad de obtener una teoría cuántica relativista, como una generalización a la teoría de Schrödinger usada en problemas no relativistas. Dirac enfocó su esfuerzo para obtener una ecuación covariante de la forma

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi, \quad (\text{A.1})$$

que no exhibiera problemas con la interpretación probabilística de la función de onda, en particular salvando el problema de que la densidad de probabilidad ρ en su análogo para esta nueva teoría cumpliera con la condición de ser definida positiva, hecho que no habia podido ser resultado con la teoría de Klein-Gordon. Teniendo en mente este problema, Dirac sugirió alrededor de 1928 que tal ecuación al ser lineal en la derivada temporal, también debía ser lineal en las derivadas espaciales, es decir,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \sum_{j=1}^3 \alpha_j \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} + \beta m c^2 \Psi \equiv H \Psi. \quad (\text{A.2})$$

Los coeficientes α_j y β en la ecuación anterior no podían ser simples números, debido a que la ecuación no sería invariante bajo una rotación espacial. Estos coeficientes de hecho tienen que ser matrices, dando como consecuencia que la función de onda sea un vector. Para determinar la forma de estas matrices usamos algunas propiedades físicas. En primer lugar la ecuación anterior debe llevarnos a la ecuación correcta para una partícula con energía relativista dada por la ecuación de Klein-Gordon

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = (-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4) \Psi. \quad (\text{A.3})$$

Luego entonces si iteramos la Ec.(A.2), encontramos

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} &= -\hbar^2 c^2 \sum_{j,k=1}^3 \frac{\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^k \partial x^j} \\ &\quad + \frac{\hbar m c^3}{i} \sum_{j=1}^3 (\alpha_j \beta + \beta \alpha_j) \frac{\partial \Psi}{\partial x^j} + \beta^2 m^2 c^4 \Psi, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

podemos entonces obtener la Ec.(A.3) si las matrices α_j y β obedecen la siguiente algebra:

$$\begin{aligned}\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j &= 2\delta_{jk} \\ \alpha_j \beta + \beta \alpha_j &= 0 \\ \alpha_j^2 &= \beta^2 = 1\end{aligned}\tag{A.5}$$

Otra propiedad que nos va a permitir encontrar explícitamente las cuatro matrices α_j y β es que deben ser matrices hermitianas, esta propiedad se hereda del hecho de que el Hamiltoniano en la Ec.(A.2) debe ser hermitiano. Ahora bien, usando el hecho de que $\alpha_j^2 = \beta^2 = 1$, obtenemos que los eigenvalores de estas matrices son ± 1 . Además, tenemos que la traza de estas matrices es cero, veámoslo. De la segunda relación de (A.5), se encuentra

$$\alpha_j = -\beta \alpha_j \beta$$

por las propiedades cíclicas de la traza se puede escribir

$$Tr \alpha_j = -Tr \beta \alpha_j \beta = -Tr \beta^2 \alpha_j = -Tr \alpha_j = 0.\tag{A.6}$$

Ya que la traza es la suma de los eigenvalores, el número de eigenvalores positivos y negativos debe de ser igual, y como consecuencia α_j y β tienen que ser matrices con dimensión par. El número par más chico es el 2, sin embargo, las matrices que buscamos no pueden ser de 2×2 puesto que en ese caso solo tenemos 3 matrices que anticonmutan, que son las conocidas matrices de Pauli. La dimensionalidad que sigue es con 4 eigenvalores, tal es el caso que considera la teoría introducida por Dirac. Una representación particular de estas matrices es

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},\tag{A.7}$$

donde las σ_j son las matrices de Pauli y las entradas con el simbolo 1 en la matriz β representa matrices unitarias de 2×2 .

Construyamos ahora la ley diferencial de conservación de corriente, con este proposito, primero introducimos la función hermitiana conjugada $\Psi^\dagger = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, \Psi_3^*, \Psi_4^*)$. Multiplicando por la izquierda la Ec.(A.2) por esta función Ψ^\dagger , se obtiene

$$i\hbar \Psi^\dagger \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \sum_{j=1}^3 \Psi^\dagger \alpha_j \frac{\partial \Psi}{\partial x^j} + mc^2 \Psi^\dagger \beta \Psi\tag{A.8}$$

ahora formamos la ecuación hermitica conjugada de la Ec.(A.2) y la multiplicamos por la derecha por Ψ

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t} \Psi = \frac{\hbar c}{i} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial x^j} \alpha_j \Psi + mc^2 \Psi^\dagger \beta \Psi\tag{A.9}$$

donde usamos la hermiticidad de las matrices α_j y β . Restando Ec.(A.9) de Ec.(A.8), encontramos

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^\dagger \Psi}{\partial t} = \sum_{j=1}^3 \frac{\hbar c}{i} \frac{\partial (\Psi^\dagger \alpha_j \Psi)}{\partial x^j},\tag{A.10}$$

lo que también puede escribirse como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } j = 0, \quad (\text{A.11})$$

podemos hacer la identificación de la densidad de probabilidad

$$\rho = \Psi^\dagger \Psi = \sum_{\sigma=1}^4 \Psi_\sigma^* \Psi_\sigma \quad (\text{A.12})$$

y de la densidad de corriente con 3 componentes

$$j^k = c \Psi^\dagger \alpha^k \Psi. \quad (\text{A.13})$$

Integrando la Ec.(A.11) sobre todo el espacio y usando el teorema de Green, encontramos

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x \Psi^\dagger \Psi = 0 \quad (\text{A.14})$$

lo que nos permite la interpretación de $\rho = \Psi^\dagger \Psi$ como una densidad de probabilidad positiva definida.

Finalmente para tener una construcción completa de la teoría de Dirac, definamos la forma covariante de la ecuación de Dirac. Comencemos escribiendo la Ec.(A.2) de la siguiente manera

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2) \Psi, \quad (\text{A.15})$$

multiplicando por β por la derecha y usando las relaciones de (A.5) podemos escribir

$$i\hbar \beta \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (-i\hbar c \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta^2 mc^2) \Psi, \quad (\text{A.16})$$

definiendo el cuadrivector $\gamma^\mu = (\beta^2, \beta \boldsymbol{\alpha}) = (\gamma^0, \gamma^i)$, que satisface las siguientes relaciones

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2\delta^{\mu\nu}, \quad \mu = \nu = 0, 1, 2, 3, 4$$

$$(\gamma^0)^2 = 1 \quad (\text{A.17})$$

$$(\gamma^i)^2 = -1, \quad i = 1, 2, 3.$$

Aquí hemos usado la convención de que los signos griegos corren de 0 a 4 y los latinos de 1 a 3. En forma compacta estas relaciones pueden escribirse como

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \quad (\text{A.18})$$

donde $g^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$. De esta manera podemos escribir la ecuación de Dirac como

$$i\hbar \gamma^0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla \Psi - mc^2 \Psi = 0 \quad (\text{A.19})$$

ecuación que puede reescribirse en forma covariante como

$$(i\hbar c \gamma^\mu \partial_\mu - mc^2) \Psi = 0. \quad (\text{A.20})$$

En el caso de grafeno necesitamos la ecuación de Dirac en el plano, para obtenerla simplemente se debe eliminar la tercera componente espacial de la ecuación en (3+1) dimensiones, además se debe tomar $m = 0$. Luego entonces, si hacemos esto, es fácil ver que en (2+1) dimensiones se necesitan únicamente tres matrices γ y para satisfacer la forma en que está factorizada la ecuación de Dirac, nos basta utilizar matrices de 2×2 , así que podemos contruir esta representación utilizando matrices de Pauli. Si hacemos esto encontramos que existen dos representaciones de las matrices γ [111], [112]. Podemos escogerlas de la siguientes formas

$$\gamma^0 = \sigma_z, \quad \gamma^1 = i\sigma_x, \quad \gamma^2 = i\sigma_y, \quad (\text{A.21})$$

$$\gamma^0 = \sigma_z, \quad \gamma^1 = i\sigma_x, \quad \gamma^2 = -i\sigma_y. \quad (\text{A.22})$$

Apéndice B

Relaciones de conmutación

Los conmutadores $[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y]$ y $[\partial/\partial t, \hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y]$ necesarios para la obtención de la ecuación (3.10) del texto se calculan del siguiente modo.

En primer lugar vamos a calcular el conmutador entre $\hat{\pi}_x$ y $\hat{\pi}_y$. Recordando que las expresiones para esos operadores son

$$\hat{\pi}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \quad (\text{B.1})$$

y

$$\hat{\pi}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \quad (\text{B.2})$$

donde \mathbf{A} es el potencial vectorial que incluye los efectos del campo electromagnético. Obtenemos entonces para conmutador $[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y]$ la siguiente expresión

$$[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] = \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right] \quad (\text{B.3})$$

Como es usual necesitamos aplicarle a una función $\Psi(x, y)$ arbitraria el conmutador anterior. Tenemos entonces

$$\begin{aligned} \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right] \Psi(x, y) &= \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, -\frac{e}{c} A_y \right] \Psi(x, y) + \left[-\frac{e}{c} A_x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right] \Psi(x, y) \quad (\text{B.4}) \\ &= i \frac{\hbar e}{c} \left(\frac{\partial A_y \Psi(x, y)}{\partial x} - A_y \frac{\partial \Psi(x, y)}{\partial x} + A_x \frac{\partial \Psi(x, y)}{\partial x} - \frac{\partial A_x \Psi(x, y)}{\partial y} \right) \\ &= i \frac{\hbar e}{c} \left(A_y \frac{\partial \Psi(x, y)}{\partial x} + \Psi(x, y) \frac{\partial A_y}{\partial x} - A_y \frac{\partial \Psi(x, y)}{\partial x} + A_x \frac{\partial \Psi(x, y)}{\partial x} - \Psi(x, y) \frac{\partial A_x}{\partial y} - A_x \frac{\partial \Psi(x, y)}{\partial x} \right) \\ &= i \frac{\hbar e}{c} \left(\Psi(x, y) \frac{\partial A_y}{\partial x} - \Psi(x, y) \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

obtenemos entonces

$$[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] \Psi(x, y) = i \frac{\hbar e}{c} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \Psi(x, y) \quad (\text{B.5})$$

Usando que el campo magnético \mathbf{B} en términos del potencial vectorial \mathbf{A} es

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (\text{B.6})$$

obtenemos que la componente \mathcal{B}_z del campo electromagnético se escribe de la siguiente manera

$$\mathcal{B}_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \quad (\text{B.7})$$

se concluye entonces que el operador buscado puede escribirse como

$$[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] = \frac{i\hbar e}{c} \mathcal{B}_z \quad (\text{B.8})$$

El otro operador $[\partial/\partial t, \hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y]$ puede expresarse en términos de los operadores de momento \hat{p}_i y del potencial vectorial \mathbf{A} de la siguiente manera

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \pm i \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) \right] \quad (\text{B.9})$$

como el operador parcial del tiempo y los operadores de momento conmutan queda entonces la siguiente expresión para el conmutador aplicado a una función arbitraria del tiempo

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t}, -\frac{e}{c} A_x \pm i \left(-\frac{e}{c} A_y \right) \right] \Psi(t) &= -\frac{e}{c} \left\{ \frac{\partial A_x \Psi(t)}{\partial t} - A_x \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} \pm i \left(\frac{\partial A_y \Psi(t)}{\partial t} - A_y \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} \right) \right\} \\ &= -\frac{e}{c} \left\{ A_x \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} + \Psi(t) \frac{\partial A_x}{\partial t} - A_x \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} \pm i \left(A_y \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} + \Psi(t) \frac{\partial A_y}{\partial t} - A_y \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} \right) \right\} \\ &= -\frac{e}{c} \left\{ \frac{\partial A_x}{\partial t} \pm i \frac{\partial A_y}{\partial t} \right\} \Psi(t) \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Puesto que el campo eléctrico en términos del potencial vectorial es

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (\text{B.11})$$

entonces

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}, \hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y \right] = e(E_x \pm iE_y) \quad (\text{B.12})$$

Apéndice C

Base de pseudohelicidad

El Hamiltoniano para partículas libres con vectores de onda cercanos al punto K de la primera zona de Brioullin en una muestra de grafeno puede escribirse como

$$H = v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.1})$$

donde \hat{p}_i ($i = x, y$) son los operadores de momento. Luego entonces la dinámica de esos electrones se describe por la siguiente ecuación de Dirac

$$v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix} \Psi(x, y, t) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t} \quad (\text{C.2})$$

este hamiltoniano tiene estados estacionarios y su solución puede escribirse de la siguiente manera

$$\Psi(x, y, t) = e^{ip_x x/\hbar + ip_y y/\hbar - i\epsilon t/\hbar} \mathbf{u} \quad (\text{C.3})$$

donde \mathbf{u} es un espinor que encontraremos posteriormente en este apéndice. Sustituyendo el espinor anterior en la ecuación de Dirac obtenemos la siguiente ecuación de eigenvalores

$$\begin{pmatrix} 0 & v_F(p_x - ip_y) \\ v_F(p_x + ip_y) & 0 \end{pmatrix} \Psi(x, y, t) = \epsilon \Psi(x, y, t), \quad (\text{C.4})$$

$$v_F \begin{pmatrix} -\epsilon & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -\epsilon \end{pmatrix} \Psi(x, y, t) = 0.$$

Para encontrar los valores propios hacemos el determinante de la matriz anterior igual a cero

$$\det \begin{pmatrix} -\epsilon & v_F(p_x - ip_y) \\ v_F(p_x + ip_y) & -\epsilon \end{pmatrix} = 0, \quad (\text{C.5})$$

obtenemos, por lo tanto, los dos siguientes eigenvalores

$$\epsilon = \pm v_F \sqrt{p_x^2 + p_y^2}. \quad (\text{C.6})$$

Estos son los eigenvalores de pseudohelicidad. Los vectores propios correspondientes son: para el signo mas de la raíz

$$\mathbf{u}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{(p_x + ip_y)}{\sqrt{p_x^2 + p_y^2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta} \end{pmatrix} \quad (\text{C.7})$$

y para el signo menos de la raíz

$$\mathbf{u}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{(p_x + ip_y)}{\sqrt{p_x^2 + p_y^2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.8})$$

donde para ambos vectores propios el ángulo θ queda deteminado por

$$\theta = \tan \left(\frac{p_y}{p_x} \right), \quad (\text{C.9})$$

De la teoría de matrices sabemos que es posible construir una transformación unitaria que nos lleve a escribir el Hamiltoniano de la Ec.(C.1) en forma diagonal, usando para ello los vectores propios de pseudohelicidad expresados en las Ecs.(C.7) y (C.8). La matriz que nos lleva a un Hamiltoniano diagonal tiene los vectores de pseudohelicidad como columnas y se escribe del siguiente modo

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{i\theta} & -e^{i\theta} \end{pmatrix} \quad (\text{C.10})$$

para comprobar esta aseveración, hagamos la transformación del Hamiltoniano

$$H' = U^\dagger H U \quad (\text{C.11})$$

$$H' = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\theta} \\ 1 & -e^{-i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & v_F (p_x - ip_y) \\ v_F (p_x + ip_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{i\theta} & -e^{i\theta} \end{pmatrix}$$

$$H' = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\theta} \\ 1 & -e^{-i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_F (p_x - ip_y) e^{i\theta} & -v_F (p_x - ip_y) e^{i\theta} \\ v_F (p_x + ip_y) & v_F (p_x + ip_y) \end{pmatrix}$$

$$H' = \frac{v_F}{2} \begin{pmatrix} 2(\hat{p}_x \cos \theta + \hat{p}_y \text{sen} \theta) & 2(-i\hat{p}_x \text{sen} \theta + i\hat{p}_y \cos \theta) \\ 2(i\hat{p}_x \text{sen} \theta - i\hat{p}_y \cos \theta) & -2(\hat{p}_x \cos \theta + 2\hat{p}_y \text{sen} \theta) \end{pmatrix}$$

recordando la Ec.(C.9), obtenemos finalmente

$$H' = \begin{pmatrix} +v_F \sqrt{p_x^2 + p_y^2} & 0 \\ 0 & -v_F \sqrt{p_x^2 + p_y^2} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.12})$$

Apéndice D

Teoría de Floquet

Comencemos por enunciar el teorema de Floquet [113] que dice:

Si un operador lineal L al actuar sobre funciones de variable s , es invariante ante la traslación $s' = s + a$, entonces las funciones propias del operador L pueden escogerse en la forma $\exp(i\alpha s) u(s)$, donde $u(s)$ es una función periódica de periodo a , es decir, $u(s + a) = u(s)$.

El teorema de Bloch es, por lo tanto, un caso particular del teorema de Floquet, pues si se considera a s como una coordenada espacial \mathbf{r} (por ejemplo, cuando se estudia un sólido cristalino), se obtienen los estados de Bloch

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u(\mathbf{r}, t) \quad (\text{D.1})$$

donde \mathbf{k} es el cuasimomento y $u(\mathbf{r}, t)$ es una función periódica en el espacio, es decir, $u(\mathbf{r} + \mathbf{R}, t) = u(\mathbf{r}, t)$.

Por otra parte, la teoría de Floquet también se cimenta sobre el teorema de Floquet, solo que en este caso el operador lineal es periódico en el tiempo. Tomemos, por ejemplo, el caso de un sistema cuántico en que se tiene un operador Hamiltoniano que es periódico en el tiempo

$$H(\mathbf{r}, t) = H(\mathbf{r}, t + T) \quad (\text{D.2})$$

donde $T = 2\pi/\omega$ es el periodo. El problema dinámico se describirá por la siguiente ecuación de Schrödinger

$$\left(H(\mathbf{r}, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi_\alpha(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (\text{D.3})$$

de acuerdo al teorema de Floquet en este caso las funciones propias tendrán la forma

$$\Psi_\alpha(\mathbf{r}, t) = \exp(-i\epsilon_\alpha t/\hbar) \Phi_\alpha(\mathbf{r}, t) \quad (\text{D.4})$$

donde $\Phi_\alpha(\mathbf{r}, t)$ es el modo de Floquet que cumple con ser periódico en el tiempo

$$\Phi_\alpha(\mathbf{r}, t) = \Phi_\alpha(\mathbf{r}, t + T) \quad (\text{D.5})$$

y ϵ_α es un parámetro al que le denomina cuasienergía, que es única salvo múltiplos de $\hbar\omega$. La denominación cuasienergía refleja un análogo con el cuasimomento \mathbf{k} que caracteriza a los estados de Bloch en un sólido periódico. Después de substituir la Ec.(D.4) en la Ec.(D.3), se obtiene la siguiente ecuación para la cuasienergía ϵ_α

$$\left(H(\mathbf{r}, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Phi_\alpha(\mathbf{r}, t) = \epsilon_\alpha \Phi_\alpha(\mathbf{r}, t) \quad (\text{D.6})$$

donde el operador

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, t) = \left(H(\mathbf{r}, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \quad (\text{D.7})$$

es hermitiano. De lo anterior se desprende una conclusión importante y es que las cuasienergías ϵ_α son reales. También puede notarse que los modos de Floquet no son únicos pues

$$\Phi_{\alpha'}(\mathbf{r}, t) = \Phi_\alpha(\mathbf{r}, t) \exp(in\omega t) \equiv \Phi_{\alpha+n}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{D.8})$$

con n un número entero $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ es una solución equivalente a la expresada en la Ec.(D.4), con la salvedad de que las energías se modifican de la siguiente manera

$$\epsilon_\alpha \rightarrow \epsilon_{\alpha'} = \epsilon_\alpha + n\hbar\omega \equiv \epsilon_{\alpha+n}. \quad (\text{D.9})$$

El índice α corresponde a una clase de soluciones caracterizadas por el conjunto $\alpha' = (\alpha, n)$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Los valores propios $\{\epsilon_\alpha\}$, por lo tanto, mapearse a la primera zona de Brillouin

$$-\frac{\hbar\omega}{2} \leq \epsilon \leq \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (\text{D.10})$$

Otra conclusión que puede obtenerse apartir de que el operador $\mathcal{H}(\mathbf{r}, t)$ es hermitiano es que los modos de Floquet correspondientes a diferentes cuasienergías son ortonormales y forman un conjunto completo de eigenfunciones. Esta ortogonalidad y completez debe entenderse en el espacio de Hilbert $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$, construido apartir de Hilbert \mathcal{R} de las funciones de cuadrado integrable en el espacio de configuración y del espacio \mathcal{T} de las funciones con periodicas en el tiempo con periodo $T = 2\pi/\omega$. Para la parte espacial el producto interno, considerando dos funciones arbitrarias de cuadrado integrables $f(\mathbf{r})$ y $g(\mathbf{r})$, se define como

$$\langle f(\mathbf{r}) | g(\mathbf{r}) \rangle = \int d\mathbf{r} f^*(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}) \quad (\text{D.11})$$

por otra parte, para la parte temporal el producto interno se define como

$$(a(t), b(t)) = \frac{1}{T} \int_0^T dt a^*(t) b(t) \quad (\text{D.12})$$

donde $a(t)$ y $b(t)$ son dos funciones periódicas en el tiempo con periodo T y cuya magnitud es finita.

Con estas definiciones y suponiendo que el modo de floquet se compone de un conjunto de funciones propias espaciales ortonormales $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$, mientras que la parte temporal puede expandirse en términos de un conjunto ortonormal de vectores de Fourier $\langle t | n \rangle = \exp(in\omega t)$, con n un entero. Podemos escribir que la condición de ortonormalidad de los modos de Floquet $\Phi_\alpha(\mathbf{r}, t)$ de la que se hablo un poco antes puede expresarse en el espacio de Hilbert compuesto $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$ como

$$\langle\langle\Phi_{\alpha'}(t)|\Phi_{\beta'}(t)\rangle\rangle\equiv\frac{1}{T}\int_0^T dt\int_{-\infty}^{\infty} dx\Phi_{\alpha n}^*(\mathbf{r},t),\Phi_{\beta m}(\mathbf{r},t)=\delta_{\alpha\beta}\delta_{n,m} \quad (\text{D.13})$$

y la relación de completéz se escribe de la siguiente manera

$$\sum_{\alpha}\sum_n\Phi_{\alpha n}^*(\mathbf{r},t),\Phi_{\alpha n}(\mathbf{r}',t')=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t-t') \quad (\text{D.14})$$

debe hacerse notar que esta última suma se extiende sobre todas las zonas de Brioullin.

El formalismo de Floquet para el estudio de idoneo para el estudio de sistemas cuánticos bajo la acción de campos periódicos, ya que no solo respeta la periodicidad de la perturbación en todos los niveles de aproximación, sino que también evita intrínsecamente la ocurrencia de los llamados términos seculares (aquellos lineales o no periódicos en la variable temporal). Estos términos aparecen típicamente al aplicar la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo convencional de Rayleigh-Schrödinger. Además de lo anterior, también permite calcular la probabilidad de que existan transiciones en un sistema que este influenciado por un potencial que dependiente del tiempo y que sea periódico. Veamos como se hace esto, supongamos que nuestro sistema esta descrito por un Hamiltoniano

$$H(\mathbf{r},t)=H_0(\mathbf{r})+V(\mathbf{r},t), \quad \text{donde} \quad V(\mathbf{r},t)=V(\mathbf{r},t+T). \quad (\text{D.15})$$

En este caso asumimos que el Hamiltoniano $H_0(x)$ posee un conjunto completo de funciones propias $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$, con sus correspondientes energías propias $\{E_n\}$. Ahora bien, con la teoría de Floquet sabemos que cualquier estado $\Psi(\mathbf{r},t)$ a un tiempo posterior puede escribirse como una combinación lineal de las soluciones $\Psi_{\alpha}(\mathbf{r},t)$ (Ec.(D.4)) del problema descrito por la Ec.(D.15), es decir,

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\sum_{\alpha}c_{\alpha}\Psi_{\alpha}(\mathbf{r},t). \quad (\text{D.16})$$

Luego entonces, la probabilidad de que este estado se encuentre en una de las funciones propias del Hamiltoniano $H_0(\mathbf{r},t)$, es simplemente

$$\langle\varphi_n(\mathbf{r})|\Psi(\mathbf{r},t)\rangle=\int\sum_{\alpha}d\mathbf{r}\varphi_n^*(\mathbf{r})c_{\alpha}\Psi_{\alpha}(\mathbf{r},t). \quad (\text{D.17})$$

Apéndice E

Programa

El siguiente es el programa en C que permite calcular los espectros de los límites de campos eléctricos intensos y campos eléctricos débiles mostrados en las Fig.(3.2) y (3.4) de la sección 3.3.

```
#include<stdio.h>

#include<math.h>

int main(){

FILE *fp; // Imprimir un archivo

fp=fopen("mat.dat","w");

int m,i,j;

float e[201],d[101],alpha,beta,alpha1,mu,a,q;

float pi=3.141592653589;

a=0.5;

q=0;

for(q=-10;q<10;q+=0.02){

for(a=-5;a<10;a+=0.07){ // region a-q

for(m=0;m<=248;m+=2){

e[m]=q/((m*m*1.0)-a);} // componentes del vector gamma
```

```

//Los primeros determinantes
d[3]=-2*e[2]*e[2]*e[0]*e[4]*e[4]*e[6]+e[2]*e[2]*e[4]*e[4]
-2*e[4]*e[4]*e[2]*e[0]*e[6]*e[6]+2*e[2]*e[4]*e[4]*e[6]
+e[4]*e[4]*e[6]*e[6]+2*e[2]*e[2]*e[0]*e[4]+4*e[2]*e[0]*e[6]*e[4]-
2*e[2]*e[4]-2*e[6]*e[4]-2*e[2]*e[0]+1;
d[2]=1-2*e[2]*e[4]-2*e[2]*e[0]+2*e[2]*e[2]*e[0]*e[4]+e[2]*e[2]*e[4]*e[4];
d[1]=1-2*e[2]*e[0];
d[0]=1;
for(m=4; m<=100; m++){ //Aqui va el metodo de iteracion de Strang
alpha=e[2*m]*e[2*(m-1)];
beta=1-alpha;
alpha1=e[2*(m-1)]*e[2*(m-2)];
d[m]=beta*d[m-1] - alpha*beta*d[m-2] + alpha*alpha1*alpha1*d[m-3]; }
//Para encontrar mu, se hace la separacion dependiendo del valor de a
if(a>=0){ mu=acos( 1 - (d[100])*(1-cos(pi*sqrt(a)))) / (pi);}
if(a<0){ mu=acos( 1 - (d[100])*(1-cosh(pi*sqrt(fabs(a)))) / (pi);}
if (mu != mu){mu=0.000000;} //Si mu=nan entonces se hace cero
fprintf(fp, "%f%f%f \n", q, a, mu);}fprintf(fp, "\n");}
}

```

Apéndice F

Artículos.

F.1. Artículos publicados.

1) G. G. Naumis y F. J. López-Rodríguez, The electronic spectrum of a quasiperiodic potential: From the Hofstadter butterfly to the Fibonacci chain, *Physica B* **403**, 1755 (2008).

2) F. J. López Rodríguez y Gerardo G. Naumis., Analytic solution for electrons and holes in graphene under electromagnetic waves: Gap appearance and nonlinear effects, *Phys. Rev. B*, **78**, 201406 (R) (2008); Erratum, *Phys. Rev. B* **79**, 049901(E) (2009).

3) F. J. López Rodríguez y Gerardo G. Naumis, Graphene under perpendicular incidence of electromagnetic waves: Gaps and band structure, *Phil. Magazine* **90**, 2977 (2010).

F.2. Relación de citas a los artículos publicados.

Del artículo: G. G. Naumis y F. J. López-Rodríguez, The electronic spectrum of a quasiperiodic potential: From the Hofstadter butterfly to the Fibonacci chain, *Physica B* **403**, 1755 (2008). La cita es:

1) O. Borchin, Energy bands splitting in the Kohmoto model, *Romanian Reports in Physics*, Vol. **61**, Vo. 3, 479-486, (2009).

Del artículo : F.J. López-Rodríguez, G.G. Naumis “Analytic solution for electrons and holes in graphene under electromagnetic waves: Gap appearance and nonlinear effects”, *Phys. Rev. B* **78**, (R), 201406 (2008). Las citas son:

1) O.V. Kibis, Metal-insulator transition in graphene induced by circularly polarized photons, *Phys. Rev. B* **81**, 165433 (2010).

2) C.G. Rocha, L.E.F. Foa Torres, G. Cuniberti, ac transport in graphene-based Fabry-Pérot devices, *Phys. Rev. B* **81**, 115435 (2010).

- 3) Mikhailov SA, Nonlinear Electrodynamical Properties Of Graphene, TRANSPORT AND OPTICAL PROPERTIES OF NANOMATERIALS Book Series: AIP Conference Proceedings, Volume: **1147** Pages: 54-61 (2009).
- 4) D. S. L. Abergel, T. Chakraborty, "Generation of valley polarized current in bilayer graphene", Appl. Phys. Lett. **95**, 062107, (2009).
- 5) L.E.F. Foa Torres, G. Cuniberti, AC transport in carbon-based devices: challenges and perspectives, Comptes Rendus Physique, Volume **10**, Issue 4, Pages 297-304. (2009).
- 6) P. H. Rivera, A. L. C. Pereira, and P. A. Schulz, Quasienergy spectra of graphene dots in intense ac fields: Field anisotropy and photon-dressed quantum rings, Phys. Rev. B **79**, 205406 (2009).
- 7) D. S. L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler y Tapash Chakraborty, Properties of Graphene: A Theoretical Perspective, Advances in Physics, en prensa (2010).
- 8) C. Hua Yan y L. Fu Wei, Tunneling of Dirac particles across graphene junctions bilaterally driven by ac signals, Physica B, en prensa (2010).

Bibliografía

- [1] R.F. Curl, Rev. Mod. Phys. **69**, 691(1997).
- [2] R. E. Smalley, Rev. Mod. Phys. **69**, 723(1997).
- [3] H. Kroto, Rev. Mod. Phys. **69**, 703(1997).
- [4] S. Iijima, T. Ichihashi, Nature **363**, 603 (1993).
- [5] D. S. Bethune, C. H. Klang, M. S. de Vries, G. Gorman, R. Savoy, J. Vazquez, R. Beyers, Nature **363**, 605, (1993).
- [6] M. S. Dresselhaus, y G. Dresselhaus, Intercalation compounds of graphite. Adv. Phys. **51**, 1 (2002).
- [7] A. Nagashima, et al. Surf. Sci, **291**, 93 (1993).
- [8] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva y A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2005).
- [9] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, y A. K. Geim, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **102**, 197 (2005).
- [10] A. C. Ferrari, J. C. Meyer, V. Scardaci, C. Casiraghi, M. Lazzeri, F. Mauri, S. Piscanec, D. Jiang, K. S. Novoselov, S. Roth, y A. K. Geim, Phys. Rev. Lett., **97**, 187401 (2006).
- [11] M. Terrones, Nature **458**, 845 (2009).
- [12] D. V. Kosynkin, A. L. Higginbotham, A. Sinitskii, J. R. Lomeda, A. Dimiev, B. K. Price, J. M. Tour, Nature **458**, 872 (2009)
- [13] Jessica Campos Delgado, José Manuel Romo-Herrera, Xiaoting Jia, D. A. Cullen, H. Muramatsu, Y. A. Kim, T. Hayashi, Z. Ren, D. J. Smith, Y. Okuno, T. Ohba, H. Kanoh, K. Kaneko, M. Endo, H. Terrones, M. S. Dresselhaus y M. Terrones, NanoLetters **8**, 2773 (2008).
- [14] A. K. Geim y K. S. Novoselov, Nature **6**, 183.(2007).
- [15] N. D. Mermin, Phys. Rev., **176**, 250 (1968).
- [16] Y. Zhang, J. W. Tan, H. L. Stormer, y P. Kim, Nature **438**, 201 (2005).
- [17] J. C. Meyer, et. al. Nature(en prensa) doi:10.1038/nature05545.

- [18] C. H. Lui, L. Lui, K. F. Mak, G. W. Flynn y T. F. Heinz, *Nature* **462**, 339 (2009).
- [19] P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- [20] L. Brey y H. A. Fertig, *Phys. Rev. B* **73**, 235411 (2006).
- [21] K.S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos and A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197(2005).
- [22] S. Das Sarma, E. H. Hwang and W. K. Tse, *Phys. Rev. B*, **75**, 121406(R) (2007).
- [23] J. J. Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company (1967).
- [24] J. Schwinger, *Phys. Rev.* **82**, 664 (1951).
- [25] D. Allor, T. D. Cohen y D. A. MacGady, *Phys. Rev. D* **78**, 096009 (2008).
- [26] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson y F. Guinea, arxiv:1003.5179v1 (2010).
- [27] M. I. Katsnelson, *Materials Today* **10**, 20 (2007).
- [28] K. I. Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, and H. L. Stormer, *Solid State Communications* **146**, 351 (2008).
- [29] Y. M. Lin, K. A. Jenkins, A. Valdes-García, J. P. Small, D. B. Farmer y Ph. Avouris, arxiv:0812.1586v1 (2008).
- [30] Y.M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D. B. Farmer, H. Y. Chiu, A. Grill and Ph. Avouris, *Science* **327**, 662 (2010).
- [31] X. Wang, X. Li, L. Zhang, Y. Yoon, P. K. Weber, H. Wang, J. Guo y H. Dai, *Science* **324**, 768 (2009).
- [32] L.A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, R. Yang, E. W. Hill, K. S. Novoselov and A. K. Geim, *Science* **320**, 356 (2008).
- [33] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
- [34] E. W. Hill, A. K. Geim, K. Novoselov, F. Schedin and P. Blake, *IEEE Trans. Magn.* **42**, 2694 (2006).
- [35] N. Trombos, C. Jozsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman and b. J. van Wees, *Nature* **448**, 571 (2007).
- [36] V. M. Karpan, G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, M. Talanana, A. A. Starikov, M. Zwierzycki, J. van den Brink, G. Brocks and P. J. Kelly, *Phys. Rev Lett.* **99**, 176602 (2007).
- [37] F. Schedin, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, E. H. Hill, P. Blake, K. S. Novoselov, *Nature Materials* **6**, 652 (2007).
- [38] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar y J. Hone, *Science* **321**, 385 (2008).
- [39] R.R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres y A. K. Geim, *Science* **320**, 1308 (2008).

- [40] N.M.R. Peres, F. Guinea y A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **73**, 125411 (2006).
- [41] G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **76**, 153403 (2007).
- [42] A. Bostwick, T. Ohta, T. Seyller, K. Horn y E. Rotenberg, *Nature Phys.* **3**, 36 (2007).
- [43] M. I. Katsnelson y K. S. Novoselov, *Solid State Communications* **143**, 3 (2007).
- [44] G. W. Semenoff, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449 (1984).
- [45] K. S. Novoselov, et al., *Nature* **438**, 197 (2005).
- [46] G. B. Arfken y H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, Fourth Edition, Academic Press, San Diego.
- [47] X. Du, I. Skachko, F. Duerr, A. Luican y E. Andrei, *Nature* **462**, 192 (2009).
- [48] K. Bolotin, F. Ghahari, M. D. Shulman, H. L. Stormer y P. Kim, *Nature* **462**, 196 (2009).
- [49] S. Ryu, C. Mudry, A. Furusaki and A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. B*, **75**, 205344 (2007).
- [50] K. Ziegler, *Phys. Rev. B*, **75**, 233407(2007).
- [51] M. I. Katsnelson, *Eur. Phys. J. B*, **51**, 157 (2006).
- [52] K. Ziegler, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 266802 (2006)
- [53] L. A. Falkovsky, arXiv:0806.3663v2 [cond-mat.mes-hall].
- [54] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov y J. P. Carbotte, *New Journal of Physics* **11**, 095013 (2009).
- [55] F. Bloch *Phys.* **52** 555 (1928).
- [56] C. Zener *Proc. T. Soc. A* **145**, 523 (1934).
- [57] K. von Klitzing, G. Dorda y M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- [58] D. C. Tsui, H. L. Störmer y A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1559 (1982).
- [59] D. R. Hofstadter *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).
- [60] R. Rammal, *J. Physique* **46**, 1345 (1985).
- [61] A. Kunold y M. Torres, *Phys. Rev. B* **61**, 9879 (2000).
- [62] M. A. Zudov, R.R. Du, J. A. Simmons y J. L. Reno, *Phys. Rev. B* **64**, 201311(R) (2001).
- [63] R. G. Mani, J. H. Smet, K. von Klitzing, V. Narayanamurti, W. B. Johnson y V. Umansky, *Nature (London)* **420**, 646 (2002).
- [64] M. A. Zudov, R. R. Du, L. N. Pfeiffer y K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 046807 (2003).
- [65] R. G. Mani, *Physica E (Amsterdam)* **22**, 1 (2004).
- [66] M. Torres and A. Kunold, *Phys. Rev. B*, **71**, 115313 (2005).

- [67] T. Hartmann, F Keck, H. J. Korsch y S Mossmann, *New Journal of Physics* **6**, 2 (2004).
- [68] M. Abramowitz y I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, New York, Dover, 1972.
- [69] M. Holthaus y D. W. Hone *Phil. Mag. B* **74**, 105 (1996).
- [70] C. Waschke, H. G. Roskos, R. Schwedler, K. Leo, H. Kurz y K. Köhler, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3319 (1993).
- [71] T. Dekorsy, P. Leisching, K. Köhler y H Kurz, *Phys. Rev. B* **50**, 8106 (1994).
- [72] G. C. Cho, T. Dekorsy, H. J. Bakker, H Kurz, A. Kohl y B. Opitz, *Phys. Rev. B* **54**, 4420 (1996).
- [73] V. G. Lyssenko, G. Valusis, F Löser, T. Hasche y K. Leo, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 301 (1997).
- [74] M. B. Dahan, E. Peik, J. Reichel, Y. Castin y C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4508 (1996).
- [75] E. Peik, M. B. Dahan, I. Bouchoule, Y. Castin y C. Salomon, *Phys. Rev. A* **55**, 2989 (1997).
- [76] E. Peik, M. B. Dahan, I. Bouchoule, Y. Castin y C. Salomon, *Appl. Phys. B* **65**, 685 (1997).
- [77] Q. Niu, X. G. Zhao, G. A. Georgakis y M. G. Raizen, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4504 (1996).
- [78] S. R. Wilkinson, C. F. Bharucha, K. W. Madison, Q. Niu y M. G. Raizen, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4512 (1996).
- [79] C. F. Bharucha, K. W. Madison, P. R. Morrow, S. R. Wilkinson, B. Sundaram y M. G. Raizen, *Phys. Rev. A* **55**, R857 (1997).
- [80] K. W. Madison, C. F. Bharucha, P. R. Morrow, S. R. Wiikinson, Q. Niu, B. Sundaram y M. G. Raizen, *Appl. Phys. B* **65**, 693 (1997).
- [81] K. W. Madison, M. C. Fischer y M. G. Raizen, *Phys. Rev. A* **60**, R1767 (1999).
- [82] M. G. Raizen, C. Salomon y Q. Niu, *Phys. Today* **50**, 30 (1997).
- [83] B. P. Anderson y M. A. Kasevich, *Science* **282**, 1686 (1998).
- [84] O. Morsch, J. H. Müller, M. Cristiani, D. Ciampini y E. Arimondo, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 140402 (2001).
- [85] M. Cristiani, O. Morsch, J. H. Müller, D Ciampini y E. Arimondo, *Phys. Rev. A* **65**, 063612 (2002).
- [86] H. Trompeter, W. Krolikowski, D. N. Nesher, A. S. Desyatnikov, A. A. Sukhorukov, Y. S. Kivshar, T. Pertsch, U. Peschel y F. Lederer, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 053903 (2006).
- [87] J. Rotvig, A. P. Jauho y H. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1831 (1995).
- [88] A.. Kunold, *Electrones de Bloch y Efecto Hall Cuántico*, Tesis de Doctorado, Posgrado en Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 2003.
- [89] K. Huang, *Statistical Mechanics*, second edition, New York, John Wiley & Sons, 1987.
- [90] Harper, *Proc. Phys. Soc.* **68**, Sect. A (1955).

- [91] R. Peierls, *Z. Phys.* **80**, 763 (1933).
- [92] Ch. Tang, M. Kohmoto. *Phys. Rev. B* **34**, 2041 (1986).
- [93] U. Kuhl y H. J. Stöckmann, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3232 (1998).
- [94] O. Richoux y V. Pagneux, *Europhys. Lett.* **59**, 34 (2002).
- [95] P. Thiel, J. M. Dubois, *Nature* **406**, 570 (2000).
- [96] G. G. Naumis y F. J. López-Rodríguez, *Physica B* **403**, 1755 (2008).
- [97] P. Moras, W. Theis, L. Ferrari, S. Gardonio, J. Fujii, K. Horn, and C. Carbone, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 156401 (2006).
- [98] E. Macia, *Rep. Prog. Phys.* **69**, 397 (2006).
- [99] G. G. Naumis, Ch. Wang, M. F. Thorpe, R. A. Barrio, *Phys. Rev. B* **59**, 14302 (1999).
- [100] K. Husimi, *Prog. Theor. Phys.* **9**, 381 (1953).
- [101] T. Dittrich, P. Hanggi, G. L. Ingold, B. Kramer, G. Schon and W. Zwerger, *Quantum Transport and Dissipation Wiley-VCH, New York*, (1998).
- [102] D. P. DiVicenzo y E. J. Mele, *Phys. Rev. B* **29**, 1685 (1984).
- [103] M. Lewkowicz y B. Rosenstein, *Phys. Rev.* **109**, 106802 (2009).
- [104] E. T. Whittaker, G. N. Watson, *A Course Of Modern Analysis*, fourth edition, Cambridge University Press (1962).
- [105] J. A. Strang [arxiv:math-ph/0510076v2](https://arxiv.org/abs/math-ph/0510076v2)
- [106] C. M. Bender y S. A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers*, MacGraw-Hill, New York.
- [107] I. S. Gradshteyn y I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products*, 5th ed., Academic, San Diego (1994).
- [108] S. A. Mikhailov, *Europhys. Lett.* **79**, 27002 (2007).
- [109] H. Wang, D. Nezich, J. Kong y T. Palacios *IEEE Electron Device Lett.* **30**, 547 (2009).
- [110] J. Ward, E. Schlecht, G. Chattopadhyay, A. Maestrini, J. Gill, F. Maiwald, H. Javadi, and I. Mehdi, *IEEE Int. Microw. Symp. Dig.* **3**, 1587 (2004).
- [111] K. Simizu, *Prog. Theor. Phys.* **74**, 610 (1985).
- [112] Ma. J. Anguiano y A. Bashir, *Prog. Theor. Phys.* **37**, 71 (2005).
- [113] G. Floquet, *Ann. École Norm. Sup.* **12**, 47 (1883).

The electronic spectrum of a quasiperiodic potential: From the Hofstadter butterfly to the Fibonacci chain

Gerardo G. Naumis*, F.J. López-Rodríguez

Departamento de Física-Química, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Apartado Postal 20-364, 01000 México, D.F., Mexico

Received 29 March 2007; received in revised form 3 September 2007; accepted 2 October 2007

Abstract

We show that an electronic tight-binding Hamiltonian, defined in a quasiperiodic chain with an on-site potential given by a Fibonacci sequence, can be obtained using a superposition of Harper potentials. Since the spectrum of the Harper equation as a function of the magnetic flux is a fractal set, known as the Hofstadter butterfly, we follow the transformation of the butterfly to a new one that contains the Fibonacci potential and related approximants. As a result, the equation in reciprocal space for the Fibonacci case has the form of a chain with long range interaction between Fourier components. Then, the structure of the resulting spectrum is analyzed by calculating the components in reciprocal space of the related potentials. As an application, the correlator of each potential and some localization properties are obtained.

© 2007 Elsevier B.V. All rights reserved.

PACS: 71.23.Ft; 71.23-k; 71.70.Di; 71.23 An; 73.43.-f; 73.43.Nq

Keywords: Quasicrystals; Harper equation; Quasiperiodic potential; Hofstadter butterfly

1. Introduction

Although the discovery of quasicrystals [1], which are alloys with a structure neither periodic, nor disordered, launched an extensive investigation on quasiperiodic Hamiltonians, in fact the study of such Hamiltonians goes back to the old Frenkel–Kontorova model [2] and to the pioneer research made in the 70s [3,4]. Here the word quasiperiodic means that in the system there are incommensurate periods; and as a result, the dimension of the Fourier space is always bigger than the dimensionality of the system. One of the most famous quasiperiodic Hamiltonians was obtained by Harper in connection with a problem proposed by Peierls [3]. The idea was to find the spectrum and the wave-functions of an electron in a square lattice with a perpendicular magnetic field. Two periods are involved in the problem, the electron motion in the lattice and the cyclotron frequency [3]. The spectrum as a function

of the ratio between these two periods turned out to be a complex set known as the Hofstadter butterfly [3]. Since then, the Harper model has been very useful to investigate the transition from localized to extended eigenstates, as the spectrum passes from pure point to continuous [3–5]. Between both limits, there is a new type of spectrum which is known as singular continuous [4]. The corresponding eigenstates are called critical and display self-similar properties. For certain parameters of the Harper equation, the distribution of level spacings follows an inverse power law [6], which is a new type of spectral statistics [6], explained as a level clustering tendency [7]. Also, it has been possible to find analytical expressions for the wave-functions using quantum groups [8]. More recently, the quantum phase diagrams [9] and the electronic correlation effects have been analyzed [10].

Another quasiperiodic system that has been extensively studied is the Fibonacci chain (FC). This chain is the simplest model of a quasicrystal [11]. The importance of the FC arises because the nature of the physical properties of quasicrystals is still not well understood [12–14]. Even in

*Corresponding author.

E-mail address: naumis@fisica.unam.mx (G.G. Naumis).

the theoretical side there is a lack of understanding in how electrons propagate in two and three dimensions [15], although the situation is more clear in one dimension. As is well known, a periodic potential satisfies the Bloch's theorem, which tells that the eigenstates of the Schrödinger equation are plane waves of delocalized nature, and the energy spectrum is continuous [16]. For disordered systems, like in the one dimensional (1D) Anderson model, all the states are localized corresponding to isolated eigenvalues [17], although long-range correlations can produce extended states due to resonance effects, as in the random dimer model [18]. In more dimensions, there is a mobility edge which separates extended from localized states [17]. For most of the quasiperiodic systems in 1D, the spectrum is neither continuous nor singular, instead a new type of spectrum, called singular continuous is obtained [19]. This spectral type is similar to a Cantor set, and presents a multifractal nature. The corresponding eigenfunctions are called critical, and also show self-similarity and multifractality. In two and three dimensions, the nature of the spectrum is not known, although there seems to be a kind of mobility edge [20,21]. However, even in 1D, where large amount of work has been done, there are many unsolved questions, like the nature of conductivity [22] or diffusivity [5], the spectral statistics and the shape of many of the eigenfunctions [23,24]. Even in the FC, there are no analytical expression for the wave-functions, except for few energies [11].

The Harper and Fibonacci potentials share many characteristics; for example, both can present a multifractal spectrum with self-similar wave-functions, although the Harper equation can also present pure point and continuous spectrum. An interesting question is why Fibonacci does not show pure point or continuous spectrum. An understanding of these questions will serve to give a better picture of the electronic properties of quasiperiodic systems. For example, it can suggest a way to construct analytical solutions for the FC in terms of those solutions from Harper.

In this article, we show that in fact, the Fibonacci potential can be approximated as a superposition of Harper potentials. Then, we can follow the evolution of the Hofstadter butterfly to the equivalent in the Fibonacci case. This allows to explore the equations in reciprocal space of the FC. The layout of this work is the following, in Section 2 we show how to obtain the Fibonacci potential in terms of Harper. Section 3 is devoted to a discussion of the corresponding spectra using the properties in reciprocal space, while Section 4 is devoted to study the localization in terms of the correlators of the potential. Finally, in Section 5 the conclusions are given.

2. The Fibonacci and Harper models

As a general model we will use a tight-binding Hamiltonian of the type,

$$(E - V(n))\psi_n = t_n\psi_{n+1} + t_{n-1}\psi_{n-1}, \quad (1)$$

where ψ_n is the wave-function at site n , t_n is the resonance integral between sites n and $n+1$. For the present purposes, t_n is set to 1 for all sites. $V(n)$ is the atomic on-site potential and E are the allowed energies. The generalized Harper equation is obtained when $V(n) = V_H(n)$, with $V_H(n)$ defined as [3],

$$V_H(n) \equiv 2\lambda \cos(2\pi\phi'n + v), \quad (2)$$

where $\lambda \geq 0$ is the strength of the potential, ϕ' is a parameter that contains the ratio between the electron cyclotron frequency and the elementary quantum flux, and v is a phase shift. For a rational ϕ' , Eq. (1) can be solved by Bloch's theorem, although its value is very limited since the coefficients in Fourier space of the solution form a dense set [3]. For ϕ' irrational, the spectrum depends on the value of λ . For $\lambda < 1$, the spectrum is continuous with extended wave-functions, when $\lambda > 1$ the spectrum is made from pure points and localized solutions. At $\lambda = 1$ the spectrum is singular continuous with self-similar wave-functions.

The other potential that we will consider here, is the simplest model of a quasicrystal, called the diagonal model, obtained when $V(n)$ has two possible values, that we denote by V_A and V_B , following the Fibonacci sequence (FS). The FS is build as follows: consider two letters, A and B , and the substitution rules, $A \rightarrow B$, and $B \rightarrow AB$. If one defines the first generation sequence as $\mathcal{F}_1 = A$ and the second one as $\mathcal{F}_2 = B$, the subsequent chains are generated using the two previous rules, for instance, $\mathcal{F}_3 = AB$. Starting with an A , we construct the following sequences, A , B , AB , BAB , $ABBAB$, $BABABBAB$, and so on. Each generation obtained by iteration of the rules is labeled with an index l . The number of letters in each generation l is given by the Fibonacci numbers $F(l)$ of generation l , which satisfy: $F(l) = F(l-1) + F(l-2)$ with the initial conditions: $F(0) = 1, F(1) = 1$. There are other choices for building a model quasicrystal, since for example, one can set $V(n)$ as a constant and use the FS to define a sequence in the transfer integrals t_n . Such problem is known as the off-diagonal model. The mixed model is obtained when the FS is used both in $V(n)$ and t_n . A vast literature is available for such potentials [15], but since the results are very similar for all of these models, in the present article we will only consider the diagonal one, although the techniques presented here are also useful tools for analyzing other cases.

Our first task in order to compare the FC and the Harper potential, is to find an analytical expression for the Fibonacci potential. This can be done in the following way. By using the cut and projection method, it is very easy to prove that the position y_n of the n -esim atom in a chain determined by a FS is given by [25],

$$y_n = [n\phi],$$

where the function $[x]$ denotes the greatest integer lower than x , ϕ is a parameter which turns out to be the tangent of the angle between the real space subspace and a higher dimensional periodic lattice [25]. To obtain the Fibonacci

case, ϕ must be equal to the inverse of the golden mean $\tau^{-1} = (\sqrt{5} - 1)/2$. For other values of ϕ , one gets structures that have different kinds of quasiperiodicity, or rational approximants of quasiperiodic chains, since the main effect of ϕ is to change the sequence of the binary potential, i.e., the sequence and statistics of letters A and B . For example, if $\phi = 1$, the resulting sequence is $AAAAAA \dots$, for $\phi = \frac{1}{2}$, we have $ABABABAB \dots$ and for $\phi = \frac{2}{5}$, $ABAABAABA \dots$. As a matter of fact, the parameter ϕ is very important to understand crystal–quasicrystal transitions [26,27], since ϕ is the inclination of the subspace in the cut and projection method. It provides a symmetry order parameter for the Landau free energy and thus contains information about the thermodynamics [26]. A relevant case is obtained when $\phi = F(l)/F(l + 1)$, which are the rational approximants of the golden mean.

The next step for building the potential consists in the observation that the separation between atoms in the chain is $y_{n+1} - y_n$. It is easy to show that the separation takes only two values, l_A and l_B . Thus, we can make a potential with the sequence of spacings to get,

$$V(n) = V_B + V_A(\lfloor(n + 1)\phi\rfloor - \lfloor n\phi\rfloor). \quad (3)$$

Using the identity $x = \lfloor x \rfloor + \{x\}$, where $\{x\}$ is the decimal part of x , we obtain that $V(n)$ can be written as,

$$V(n) = \langle V \rangle + \delta V(\{n\phi\} - \{(n + 1)\phi\}), \quad (4)$$

where $\langle V \rangle = V_A\phi + V_B(1 - \phi)$ is an average potential that shifts the zero of the energies, and δV is the strength of the quasiperiodicity, measured by the difference between site-energies $\delta V \equiv V_A - V_B$. In what follows, without any loss of generality, we set V_A and V_B in such a way that $\langle V \rangle = 0$. A note of caution: is clear that our method gives the potential for all values of ϕ , and not only for the FS. To avoid confusions, here we will call “square wave potential” to all of the potentials generated from Eq. (4), since if the integer variable n is replaced by a continuous one, say x , the resulting $V(x)$ is just a square wave as shown in Fig. 1. The potential stays at $-\delta V\phi$ for an interval of length $1 - \phi$, and then it jumps to $\delta V(1 - \phi)$ for a length ϕ . The Fibonacci potential is just a particular case for $\phi = \tau^{-1}$.

The decimal part function $\{x\}$ has period 1, and can be developed as a Fourier series,

$$\{x\phi\} = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s} \sin(2\pi\phi s x).$$

It follows that,

$$V(n) = \bar{V} + 2\delta V \sum_{s=1}^{\infty} \tilde{V}(s) \cos(\pi s \phi (2n + 1)), \quad (5)$$

where $\tilde{V}(s)$ is the s harmonic of the Fourier series, $\tilde{V}(s) = \sin(\pi s \phi)/\pi s$. The first terms of this series are shown in Fig. 1, and in fact, we are approximating a square wave by a sum of cosines. In Fig. 1 we can see the slow convergence of the series due to the $1/s$ factor of each harmonic. This potential can be further reduced if a proper phase χ is used

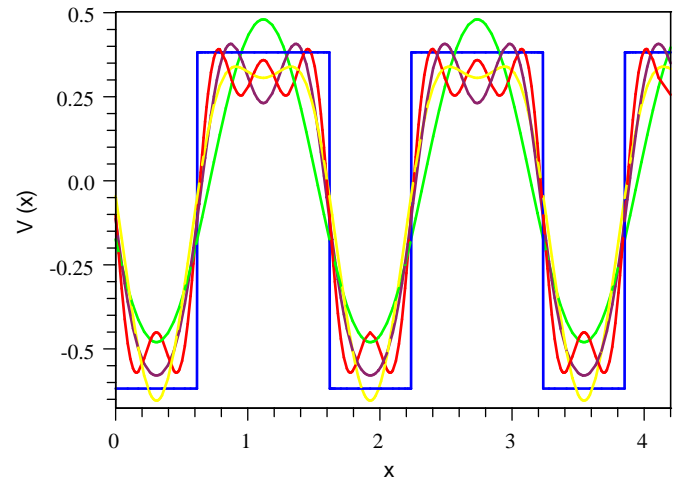


Fig. 1. The Fibonacci potential can be obtained by evaluating a square wave of period τ at integers values. The approximations with one, two and three harmonics, obtained from Eq. (6), are shown in the figure. Notice the asymmetry in the steps.

in Eq. (4), in such a way that the terms $\{x\phi\}$ are replaced by $\{x\phi + \chi\}$. The phase χ is only an horizontal translation of the potential. For $\chi = -\phi/2$, the Fibonacci potential is simply written as,

$$V(n) = 2\delta V \sum_{s=1}^{\infty} \tilde{V}(s) \cos(2\pi s \phi n). \quad (6)$$

It is also worthwhile mentioning that for $s = l\phi^{-1}$ (where l is an integer), $\tilde{V}(s) = 0$. This condition can only hold when ϕ is a rational. When this is not the case, $\tilde{V}(s) \approx 0$ for integers s and l such that $\phi \approx l/s$, and thus l/s is a rational approximant of ϕ . Such rationals are obtained from the continuous fraction development of ϕ . The corresponding potentials are just rational crystalline approximants. For the FS, $s \approx l\tau$ from where it follows that l and s are successive Fibonacci numbers. The most important Fourier components in Eq. (6) are those where $s \approx (r + \frac{1}{2})\phi^{-1}$ for an arbitrary integer r . Using the decomposition in integer and decimal parts, this happens whenever $\{(r + \frac{1}{2})\phi^{-1}\}$ is nearly 0 or 1. Comparing Eq. (2) with Eqs. (5) and (6), we observe that in fact, the Fibonacci potential can be approximated as a superposition of Harper potentials if we set $\phi' = \phi$, so this situation can be thought as an applied effective modulated magnetic field [28]. This leads to many questions. The first is how the transition from Harper is done. To answer this, we will cut the sum in Eq. (6) at a finite number of harmonics, denoted by S , and the resultant potential will be called S -harmonic potential. In Fig. 2(a), we plot the energy spectrum of the Harper equation for the case $\lambda = 1$. This spectrum, as well as the others discussed in this article, were obtained by using the transfer matrix formalism [29]. Fig. 2(a) is the well known Hofstadter butterfly [3]. Notice that here $v = \pi\phi$, and thus our figure does not match exactly the original butterfly, since therein, a sweep for all values of v between 0 and 2π

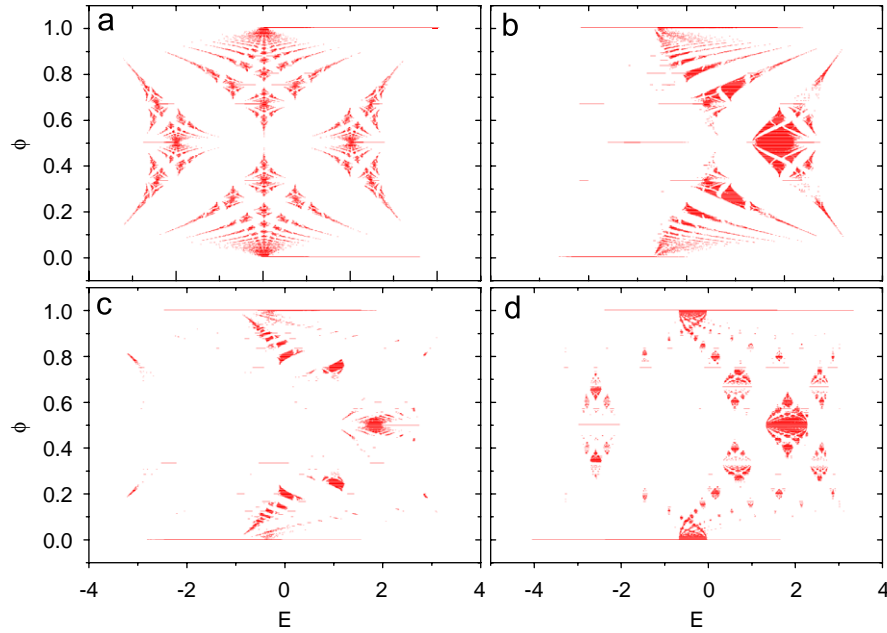


Fig. 2. The energy spectrum as a function of the parameter ϕ for $\delta V = \pi/\sin(\pi\tau^{-1})$, corresponding to $\lambda = 1$ in the pure Harper equation, using (a) one harmonic (similar to the Hofstadter butterfly), (b) two harmonics, (c) three harmonics, and (d) the square wave potential, that contains the Fibonacci potential for $\phi = \tau^{-1}$. Notice that in case (a), the Hofstadter butterfly is not exactly the usual one reported in the literature, since here we do not consider all the possible values of the phase v . As a result, the spectrum is not symmetric around $E = 0$, and some points are missing.

was made, and thus the spectrum has more points and is symmetric around $E = 0$. Our spectrum is not symmetric around $E = 0$ since the phase v produce a shift of the spectrum. We have verified that in our computer program, we reproduce the original butterfly when such sweep is made, and also that the symmetry around $E = 0$ is recovered when $v = \pi/2$. The reason of not considering all possible values of v is that we want to compare with the FC, which is defined only for a given phase. A sweep in v , is equivalent to make a sweep in χ in the S -harmonic case, which produces new chains in the same isomorphism class. If ϕ is taken as a parameter in Eq. (6), then the spectrum of Fig. 2(a) is also the S -harmonic potential for $S = 1$. The parameter used is $\delta V = \pi/\sin(\pi\tau^{-1}) \approx 3.3706$, chosen to correspond to $\lambda = 1$ in the Harper equation. In Figs. 2(b) and (c) we show the effects of adding harmonics $s = 2$ and 3 in the development of the potential, and Fig. 2(d) presents the result for the square wave potential. There is an important change between the pure Harper case and the second harmonic case. Mainly the left part of the Hofstadter butterfly is washed out. Also, is clear that with only three harmonics, the structure for $\phi = \tau^{-1}$ is already very similar to the pure Fibonacci case. This wash out due to the second harmonic has its origins in the difference of lengths in the steps of the square wave potential. For the first harmonic, this change is not observed. By looking at Fig. 1, one can see that with two harmonics there is an asymmetry in the upper part of the series. This effect is more notorious when $\delta V > 1$, and can be translated in an almost split band limit when $\delta V \rightarrow \infty$, around self-energies V_A and V_B . In fact, this is one of the main differences between the Harper and Fibonacci potentials.

In Fig. 3, a similar set of figures presents what happens when $\delta V = 1$. This corresponds to $\lambda = \sin(\pi\tau^{-1}) \approx 0.2967$ in the pure Harper case, and thus the spectrum is continuous. Figs. 3(b) and (c) are the cases with two and three harmonics. Finally Fig. 3(d) shows the case of Eq. (4), which is a beautiful fractal. Since it is known that the FC presents a singular continuous spectrum [19], it is open the question for which harmonic there is the transition from one type of spectrum to the other.

In all of the previous cases, ϕ was studied between 0 and 1 since using the following identity,

$$\cos(2\pi x) = \cos(2\pi(\lfloor x \rfloor + \{x\})) = \cos(2\pi\{x\}),$$

we have that $\cos(2\pi\phi sn + k) = \cos(2\pi\{\phi\}sn + k)$. Thus, the problem has periodicity 1 in ϕ . It only depends on ϕ only through $\{\phi\}$. For rational ϕ of the form P/Q , with P and Q integers, this means $P < Q$.

3. Structure of the spectrum

In this section we will discuss the main features that arises from the previous figures. The spectral properties of the pure Hofstadter butterfly has been discussed by many others using diverse techniques [3,4,30], but in order to understand the transformation between butterflies, here we will explain the main features using the structure in reciprocal space of the potential. Let us first study the tight-binding equation in the usual approach. We propose that the wave-function can be written as [4],

$$\psi_n = e^{ikn} \sum_{m=-\infty}^{\infty} d_m e^{im(2\pi\phi n + v)},$$

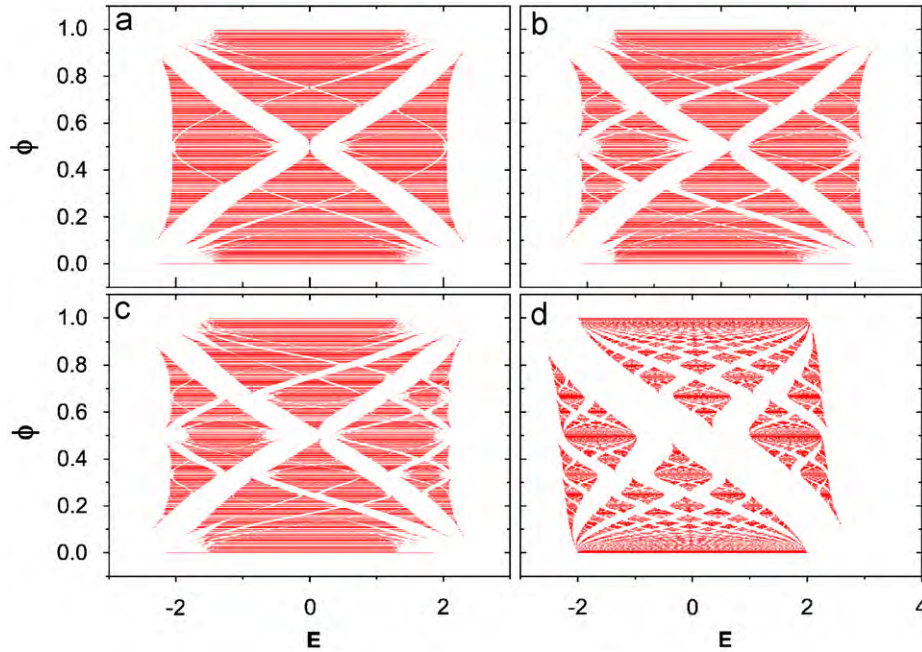


Fig. 3. The energy spectrum as a function of the parameter ϕ for $\delta V = 1$ using (a) one harmonic (corresponding to the Harper model at $\lambda = 0.2967$), (b) two harmonics, (c) three harmonics, and (d) square wave potential using Eq. (4).

where d_m is the m Fourier component of the wave-function. If we introduce this solution into Eq. (1), when S harmonics are present in the potential, the following set of equations are obtained,

$$(E^* - 2\delta V^* \cos(2\pi\phi m + k))d_m = d_{m+1} + d_{m-1} + \sum_{s=2}^S \tilde{V}^*(s)(d_{m-s} + d_{m+s}), \quad (7)$$

where the parameters are defined as $E^* = 2E/(V(1)\delta V)$, $\delta V^* = 2/(V(1)\delta V)$, and,

$$\tilde{V}^*(s) = \frac{\tilde{V}(s)}{\tilde{V}(1)} = \frac{1 \sin(\pi s \phi)}{s \sin(\pi \phi)}.$$

The other parameter is $k = v$ for the pure Harper equation, and $k = v = \pi\phi$ for the general case. If only the first harmonic $s = 1$ is used, then Eq. (7) shows that a Harper equation in the reciprocal space is also a Harper equation with a renormalized set of parameters [30]. In the case of Fibonacci, Eq. (7) proves that the Schrödinger equation in reciprocal space has a different form, since each site interacts with infinite many others. The interaction between Fourier components decreases as $1/s$. It is a long range interaction that can be thought as a modulating field. Observe that in the transformation of the Hofstadter butterfly, the limitation to S harmonics in the potential is equivalent in Fourier space to a cut-off at range S of the interaction.

When ϕ is a rational number, say P/Q , the potential with any number of harmonics has periodicity Q , as has been discussed in the previous section. The corresponding

wave-functions are given by,

$$\psi_n = e^{ikn} \sum_{m=0}^Q d_m e^{im(2\pi n(P/Q) + \pi(P/Q))}, \quad (8)$$

where $-\pi/Q < k \leq \pi/Q$. The only difference between the Harper and the Fibonacci case, is in the values of the Q coefficients d_m . Since the set d_m can be obtained in the Harper case using quantum groups [8], the present work suggests the possibility of finding an analytical solution for the Fibonacci potential.

Also, we can show that an effective potential can be written in the reciprocal space for periodic approximants of the S -harmonic potential. According to Eq. (8), the solution must have periodicity Q , with l an integer. Such result can also be obtained from $V(n)$ when ϕ is the rational P/Q . In this case, the factor $\cos(2\pi s \phi n)$ in Eq. (6) is repeated for the harmonics s' that has the form $s + lQ$ where l is a positive integer. By grouping all the harmonics module Q , the potential is written as,

$$V(n) = \bar{V} + 2\delta V \sum_{s=1}^Q \tilde{V}_{P/Q}(s) \cos\left(2\pi s \frac{P}{Q} n\right), \quad (9)$$

where $\tilde{V}_{P/Q}(s)$ is an effective potential,

$$\tilde{V}_{P/Q}(s) = \frac{Q \sin(\pi s P/Q)}{P} \left(\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^{lp}}{s + lQ} \right). \quad (10)$$

The equation in reciprocal space is then reduced as follows:

$$(E' - 2\delta V' \cos(2\pi\phi m + k))d_m = \sum_{s=1}^Q \tilde{V}_{P/Q}(s)(d_{m-s} + d_{m+s}), \quad (11)$$

which shows that for a periodic approximant, the range of the interaction in reciprocal space is Q .

Concerning the spectrum, the band edges are obtained from Eq. (7) when $k = 0$ and π/Q . Instead of following this path, we will look at how the structure of the potential in the *lattice reciprocal space* determines the spectrum for $\delta V \ll 1$. A much more physical insight can be obtained in this way. This approach is different from the one realized in others works [4,30], since usually the potential is projected in the base $e^{im(2\pi\phi n + v)}$. Here we will project into the reciprocal “vectors” of the lattice (G). The main idea is that for a 1D crystal, it is known that each reciprocal “vector” G with component of the potential ($\tilde{V}(G)$), opens a gap of size,

$$\Delta_G \approx 2\|\tilde{V}(G)\|,$$

at reciprocal vectors $q = G/2, G, 3G/2, \dots$. It is possible to follow the opening of the gaps by the effect of $\tilde{V}(G)$. The reciprocal components are

$$\tilde{V}(G) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} V(n)e^{-iGn},$$

where G can be chosen among the wave vectors $q = 2\pi t/N$, with $t = 0, \dots, N-1$, in a lattice with N sites, were periodic boundary conditions are used. The first Brillouin zone is the interval $-\pi \leq q < \pi$, although to simplify the algebra we take q between 0 and 2π . Consider first the Fourier components of the Harper potential ($\tilde{V}_H(G)$) for a given parameter ϕ ,

$$\tilde{V}_H(G) \equiv \tilde{V}_H(t) = \frac{2\lambda}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{e^{i2\pi\phi n} + e^{-i2\pi\phi n}}{2} \right) e^{-i2\pi t n/N}. \quad (12)$$

If $(\phi - t/N)$ is an integer, the problem is almost solved, because $\tilde{V}(t) = \lambda\delta(\phi - t/N)$. This happens whenever $\phi = P/Q$ and

$$\frac{P}{Q} = \frac{m}{N},$$

so when N is chosen as a multiple of Q , as for example $N = lQ$ with $l = 0, 1, 2, \dots$, then the harmonic $m = P$ is the only one that has a contribution. This solution is very simple compared with other complex approaches, since what most of the people do is fix N and then a sweep of the ϕ is made. In other words, the Hofstadter butterfly is built for a fixed N . However, the present approach shows that if we fix a rational ϕ and move N for each ϕ until $N = lQ$, the potential is much more tractable. In the limit of big l , $N \gg Q$ so there are many vectors k that fulfill the condition $N = lQ$; in other words, there is a continuum of q such that $e^{i2\pi\phi n}$ has a “possible periodicity” of the system.

The problems arise when ϕ is an irrational or N is not a multiple Q , since the previous trick is not valid. Eventually, the sum in Eq. (12) can be made when $\phi - t/N$ is not an

integer to give

$$\tilde{V}_H(G) \equiv \tilde{V}_H(t) = \frac{\lambda}{\sqrt{N}} \left(\frac{1 - e^{i2\pi\phi N}}{1 - e^{i2\pi(\phi - t/N)}} + \frac{1 - e^{-i2\pi\phi N}}{1 - e^{-i2\pi(\phi + t/N)}} \right).$$

The corresponding norm is

$$\|\tilde{V}_H(t)\|^2 = \frac{\lambda^2 A}{N B}, \quad (13)$$

where

$$A = (1 - \cos 2\pi\phi N)^2 + [\cos 2\pi\phi - \cos 2\pi\phi(N-1)]^2 - 2\cos(2\pi\phi t/N)[1 - \cos 2\pi\phi/N][\cos 2\pi\phi - \cos 2\pi\phi(N-1)],$$

and

$$B = [1 - \cos(2\pi(\phi - t/N))][1 - \cos 2\pi(\phi + t/N)].$$

Notice how $\tilde{V}_H(t) \rightarrow \lambda\delta(\phi - t/N)$ as $\phi \rightarrow t/N$. The gaps width depend upon these components, and the maximum of $\tilde{V}_H(G)$ occurs when $G \approx \pm\phi$. Now let us propose the solution,

$$\psi_n = \sum_{q=-\infty}^{\infty} c_q e^{iqn}$$

for Eq. (1). The resulting equation in reciprocal space is

$$(E - 2\cos q)c_q = \sum_G \tilde{V}_H(G)c_{q-G}.$$

Since the main contribution to $\tilde{V}_H(G)$ comes from $G \approx \pm\phi$, a mixing of wave vectors $G \approx \phi$ and $G \approx -\phi$ occurs at $q = \pm\phi/2$. Using perturbation theory, this means that for $\lambda \ll 1$, the main gaps are open around,

$$E \approx \pm\lambda \cos(2\pi(\phi/2)) = \pm\lambda \cos(\pi\phi).$$

Fig. 4 compares this prediction with the Hofstadter butterfly, showing an excellent agreement. Other band gaps are obtained at $q = \pm r\phi/2$ with $r \in \mathbb{N}$. The general p th-order perturbation term is of the form,

$$V_q = V(q_0 - q_1)V(q_1 - q_2)\cdots V(q_{N-1} - q_N),$$

where q_t labels the vector $2\pi t/N$. For small λ , gaps will be open at

$$E \approx \lambda^r \cos(\pi\phi r).$$

These cosine branches are also plotted in Fig. 4, compared with the Hofstadter butterfly, showing that the basic structure of the spectrum is determined by these branches. When λ is near 1, around each gap there are many wave vectors that mix together, so the present approximation breaks out. A detailed observation of the case of the potential with harmonics, given by Eq. (6), shows that the main effect is an asymmetry of the cosine branches. This is very clear in Figs. 3(b) and (c). The same analysis performed to the Harper equation is valid for these cases, specially for low S . The equivalent rough approximation

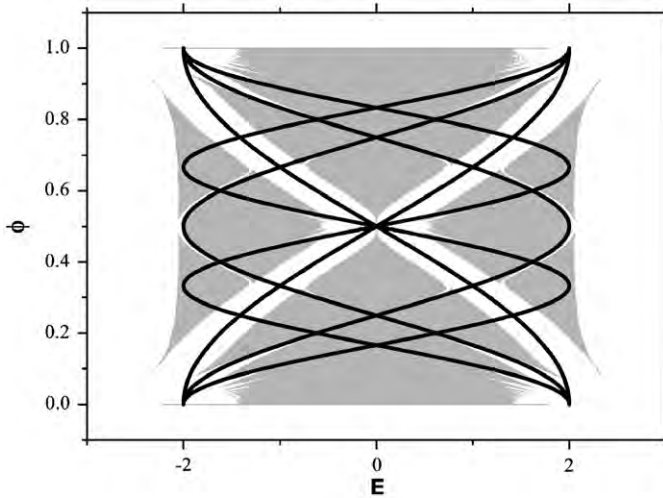


Fig. 4. General structure of all the obtained spectra. The Hofstadter butterfly is compared with the cosine branches given by $E = \lambda \cos(\phi m)$ for $m = 1, 2$ and 3 for $\lambda = 0.2967$.

for the position of the band gaps is,

$$E \approx \pm \left(\delta V \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\sin(\pi s \phi)}{\pi s} \right) \cos(\pi \phi).$$

What is behind the process of gap opening, is a self-similar folding of the bands in the reciprocal space, as revealed by following the sequence of approximants for ϕ in all the obtained spectra. For $\phi = 0$, the spectrum is continuous and goes from $-2\delta V$ to $2\delta V$. The next most simple spectrum corresponds to $\phi = \frac{1}{2}$, which gives two bands. If the lattice has period 2, then the first Brillouin zone of the zero approximant ($\phi = 0$) is folded around half the original Brillouin zone limit, $k = \pi/2$. As usual, an energy gap of size $\Delta_G \approx 2|\tilde{V}(G)|$ is open in the zone boundary due to a mixing of waves with reciprocal vectors $G/2$ and $-G/2$. In this case, $G = \pi/2$ and $\tilde{V}(G) = 2\lambda$. For the Harper equation we get,

$$\Delta_G = 4\lambda.$$

In the Harper equation, there is a symmetry around $E = 0$, thus the bands limits are $E = \pm 2\lambda$. For the pure FC first approximant ($\phi = \frac{1}{2}$), $\tilde{V}(G)$ produces a different gap, and the central gap limits are

$$\Delta_G = \pm \delta V.$$

This gap is clearly in the horizontal lines at $\phi = \frac{1}{2}$ in Fig. 3(d). The process of folding in reciprocal space can be repeated in a similar way for other rationals like $\phi = \frac{2}{3}$ and $\frac{1}{3}$. In this case, the periodicity is 3, and the folding around the first Brillouin zone limit occurs at $k = \pi/3$. Three bands are produced in this case, and the gaps are centered at $\pm \lambda \cos(\pi/3)$ and $\pm \lambda \cos(2\pi/3)$. The process is repeated for other approximants.

4. Localization properties using correlators

As a simple example of the utility of having an expansion for the FC, we will obtain the potential correlator. This can serve to understand how the addition of harmonics leads to different localization properties. For $\lambda = 1$ the eigenstates of the Harper equation are critical, i.e., the wave-functions decay as a power law, while they are localized for $\lambda > 1$ and extended for $\lambda < 1$. This comes from Eq. (7). Therein, if the square of the components is finite,

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} |d_m|^2 < \infty,$$

the corresponding wave-function is non-localized. In the pure Harper equation, when $\lambda \rightarrow \infty$, the solutions in real space are localized wave-functions, since they correspond to the dual of solutions with $\lambda \rightarrow 0$ in reciprocal space, which are known to be extended. In the FC, for all values of δV the eigenstates are critical [29]. An interesting question is how many harmonics are needed to produce the transition from the extended states in the Harper equation to the critical behavior observed in the FC. To measure localization in one dimension, the Lyapunov exponent (LE) is used (L^{-1}). The LE is the inverse of the localization length (L) for a localized state. Having the zero value of the LE, one can have a power law dependence of the wave-function. There are already many methods to treat the spectrum and the eigenfunctions, but the simplest one uses the pair correlation function of the potential [31]. This method requires that the potential must be bounded for any n , with $V(n) \ll 1$. Notice that the previous condition is the most interesting limit for quasiperiodic potentials, since for $V(n) \gg 1$ one can use perturbation theory to obtain the spectrum and eigenfunctions [32]. Also, to get analytical expressions for the LE , the potential must be ergodic [31,33], a condition that is satisfied by the potential (5), since the obtained sequences of V_A and V_B are periodic or quasiperiodic. A second condition is that the correlation matrix of the potential ($\xi_{kk'} \equiv \xi(k - k')$) must be semi-positive defined [31], where the correlator $\xi(k)$ of any potential is defined as

$$\langle V(n)V(n+k) \rangle = \varepsilon_0^2 \xi(k), \quad \langle V(n)V(n) \rangle = \varepsilon_0^2.$$

For the Harper equation, $\xi(k) = \cos(2\pi\phi k)$, and for a Fibonacci-like potential, by using Eq. (6), the correlator can be written as,

$$\xi(k) = 4\delta V \sum_{s=1}^S \frac{\sin^2(\pi s \phi)}{(s\phi)^2} \cos(2\pi s \phi k), \quad (14)$$

which satisfies the conditions for a proper correlation in order to get the analytical LE. For a 1D Hamiltonian, the inverse localization length is given by [31],

$$L^{-1} = \frac{\varepsilon_0 \varphi(\mu)}{8 \sin^2(\mu)}; \quad \varphi(\mu) = 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \xi(k) \cos(2\mu k).$$

Here, the function $\varphi(\mu)$ is given by the Fourier series with the coefficients $\xi(k)$. For the Harper equation, $\xi(k) = \cos(2\pi\phi k)$, which gives $\varphi(\mu) = 0$ and thus all states are nonexponentially localized. For Fibonacci-like, $\xi(k)$ is given by Eq. (14), which also gives $\varphi(\mu) = 0$ for all S . Thus, since the LE are 0, all states are non-localized for any number of harmonics. As a result, the states can have a power law dependence of the wave-function or they can be extended as in the Harper case. The question that remains to be answered, is how the transition from extended to critical states is achieved as the number of harmonics is increased from Harper to Fibonacci. To solve this question, an expression for the scaling exponents in terms of the correlators is needed [34]. In a forthcoming article, we will pursue such investigation.

5. Conclusions

In the present article, we have shown that the Fibonacci potential can be approximated as a sum of Harper potentials. As a consequence, one can follow the evolution of the spectral types as a function of the number of harmonics. In particular, a butterfly similar to the Hofstadter case is found, which contains the Fibonacci potential. The corresponding spectrum is a fractal object, and the Fourier components of the potential provide a simple explanation for the main features of the spectra. However, since the spectrum of the Fibonacci chain is singular continuous with power law localized states for any strength of the potential (δV), and that the Harper potential has a continuous ($\lambda < 1$), singular continuous ($\lambda = 1$), and pure point spectrum ($\lambda > 1$), with non-localized, power law, and localized states, respectively, this leads to many interesting questions, as for example, at which harmonic the spectral type is changed when the potential goes from Harper to Fibonacci. This is equivalent to ask for which harmonic the eigenfunctions of the Fibonacci case become critical.

It is worthwhile mentioning that ϕ controls the transition from periodic to quasiperiodic sequences, and thus, the present approach also leads to the possibility of studying the electronic properties as a function of such parameter. Furthermore, it can be proved that the parameter ϕ can also be related with a magnetic field, as happens in the Harper potential. In that case, instead of having a constant magnetic field in space, one has a space modulated magnetic field [35]. In real systems, the changes in ϕ are simple to study using many different devices, since its effect is only a change in the sequence of the binary potential. For example, one can use microwaves in a cavity, a dielectric superlattice or a space modulated magnetic field in a semiconductor.

Finally, the present approach also leads to the possibility of building analytical solutions for a FC. We hope that

other researchers will try to answer some of the intriguing questions posed by this paper.

Acknowledgments

We would like to thank DGAPA-UNAM projects IN-117806, CONACyT 48783-F and 50368 for financial help.

References

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* 53 (1984) 1951.
- [2] P. Tong, B. Li, B. Hu, *Phys. Rev. Lett.* 88 (2002) 046804.
- [3] D.R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* 14 (1976) 2239.
- [4] S. Aubry, G. Andre, in: *Colloquium on Group Theoretical Methods in Physics*, Preprint, 1979. Reprinted in: P. Steinhardt, S. Ostlund (Eds.), *The Physics of Quasicrystals*, World Scientific, Singapore, 1987.
- [5] R. Ketzmerick, K. Kruse, S. Kraut, T. Geisel, *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997) 1959.
- [6] K. Machida, M. Fujita, *Phys. Rev. B* 34 (1986) 7367.
- [7] T. Geisel, R. Ketzmerick, G. Petschel, *Phys. Rev. Lett.* 66 (1991) 1651.
- [8] P.B. Wiegmann, A.V. Zabrodin, *Phys. Rev. Lett.* 72 (1994) 1890.
- [9] M. Koshino, H. Aoki, T. Osada, K. Kuroki, S. Kagoshima, *Phys. Rev. B* 65 (2002) 045310.
- [10] K. Czajka, A. Gorczyca, M.M. Maska, M. Mierzejewski, *Phys. Rev. B* 74 (2006) 125116.
- [11] Ch. Tang, M. Kohmoto, *Phys. Rev. B* 34 (1986) 2041.
- [12] P. Thiel, J.M. Dubois, *Nature* 406 (2000) 571.
- [13] E.Y. Vedmendenko, U. Grimm, R. Wiesendanger, *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004) 076407.
- [14] P. Moras, et al., *Phys. Rev. Lett.* 96 (2006) 156401.
- [15] E. Macia, *Rep. Prog. Phys.* 69 (2006) 397.
- [16] Ch. Kittel, *Introduction to Solid-State Physics*, seventh ed., Wiley, New York, 1996.
- [17] R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids*, Wiley, New York, 1983.
- [18] P. Phillips, H.L. Wu, *Science* 252 (1991) 1805.
- [19] A. Sütő, in: F. Axel, D. Gratias (Eds.), *Beyond Quasicrystals*, Les Editions de Physique, France, 1994.
- [20] G.G. Naumis, R.A. Barrio, Ch. Wang, *Phys. Rev. B* 50 (1994) 9834.
- [21] G.G. Naumis, J. Phys. Condens. Matter 11 (1999) 7143.
- [22] E. Maciá, F. Dominguez-Adame, *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997) 5301.
- [23] T. Fujiwara, M. Kohmoto, T. Tokihiro, *Phys. Rev. B* 40 (1989) 7413.
- [24] E. Macia, *Phys. Rev. B* 60 (1999) 10032.
- [25] G.G. Naumis, Ch. Wang, M.F. Thorpe, R.A. Barrio, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 14302.
- [26] J.L. Aragón, M. Torres, *Europhys. Lett.* 15 (1991) 203.
- [27] M.J. Yacaman, M. Torres, *Crystal-Quasicrystal Transitions*, Wiley, New York, 1993.
- [28] Oh. Gi-Yeong, *Phys. Rev. B* 60 (1999) 1939.
- [29] G.G. Naumis, *J. Phys. Condens. Matter* 15 (2003) 5969.
- [30] D.J. Thouless, *Phys. Rev. B* 28 (1983) 4272.
- [31] F.M. Izrailev, A.A. Krokhnin, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 4062.
- [32] Q. Niu, T. Odagaki, J.L. Birman, *Phys. Rev. B* 42 (1990) 10329.
- [33] F.M. Izrailev, S. Ruffo, L. Tessler, *J. Phys. A Math. Gen.* 31 (1998) 5263.
- [34] G.G. Naumis, in press.
- [35] F.J. López-Rodríguez, G.G. Naumis, in press.

Analytic solution for electrons and holes in graphene under electromagnetic waves: Gap appearance and nonlinear effects

F. J. López-Rodríguez¹ and G. G. Naumis^{1,2,3}

¹*Departamento de Física-Química, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Apartado Postal 20-364, 01000 México D.F., Mexico*

²*Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 10001, 62210, Cuernavaca, Morelos, Mexico*

³*Departamento de Física-Matemática, Universidad Iberoamericana, Prolongación Paseo de la Reforma 880, Col. Lomas de Santa Fe, 01210 México D.F., Mexico*

(Received 22 September 2008; published 17 November 2008)

We find the exact solution of graphene carriers dynamics under electromagnetic radiation. To obtain the solution of the corresponding Dirac equation, we combine Floquet theory with a trial solution. Then the energy spectrum is obtained without using any approximation. We also prove that the energy spectrum presents a gap opening, which depends on the radiation frequency and electric wave intensity, whereas the current shows a strongly nonlinear behavior.

DOI: 10.1103/PhysRevB.78.201406

PACS number(s): 73.22.-f, 73.21.-b, 81.05.Uw

Graphene, a two-dimensional allotrope of carbon, has been the center of much research since its experimental discovery four years ago.¹ It has amazing properties.²⁻⁴ For instance, electrons in graphene behave as massless relativistic fermions.^{5,6} Such property is a consequence of its bipartite crystal structure,⁷ in which a conical dispersion relation appears near the K, K' points of the first Brillouin zone.⁸ Among other properties one can cite the high mobility that remains higher even at high electric fields and translates into ballistic transport on a submicron scale⁹ at 300 K. Graphene is therefore a promising material for building electronic devices, but there are some obstacles to overcome. One is the transmission probability of electrons in graphene, which can be unity irrespective of the height and width of a given potential barrier.² As a result, conductivity cannot be changed by an external gate voltage, a feature required to build a field-effect transistor (FET), although a quantum dot can be used. In a previous paper, we have shown that a possible way to induce a pseudogap around the Fermi energy consists of doping graphene.¹⁰ On the other hand, much effort has been devoted to understanding the electrodynamic properties of graphene as well as its frequency dependent conductivity.¹¹⁻¹⁵ In this Rapid Communication, we solve without the need of any approximation, the problem of graphene's electron behavior in the presence of an electromagnetic plane wave. As a result, we are able to find a gap opening. This is like if electrons in graphene acquire an effective mass under electromagnetic radiation. We also calculate the current and show that there is a strongly nonlinear electromagnetic response, as was claimed before by Mikhailov¹⁶ using a semiclassical approximation.

Consider an electron in a graphene lattice subject to an electromagnetic plane wave as shown in Fig. 1. The plane wave propagates along the two-dimensional space where electrons move. In this Rapid Communication we take $\mathbf{k} = (0, k)$. The generalization to any direction of \mathbf{k} is straightforward. It has been proved that a single-particle Dirac Hamiltonian can be used as a very good approximation to describe charge carriers dynamics in graphene.¹⁷ For wave vectors close to the K point of the first Brillouin zone, the Hamiltonian is¹⁸

$$H(x, y, t) = v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

where v_F is the Fermi velocity $v_F \approx c/300$, $\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c$ with $\hat{\mathbf{p}}$ being the electron momentum operator, and \mathbf{A} is the vector potential of the applied electromagnetic field, given by $\mathbf{A} = [\frac{E_0}{\omega} \cos(ky - \omega t), 0]$, where E_0 is the amplitude of the electric field and ω is the frequency of the wave. E_0 is taken as a constant since screening effects are weak in graphene.¹⁹ For the valley K' the signs before π_y are the opposite.¹⁸ The dynamics is governed by

$$H(x, y, t)\Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t}, \quad (2)$$

where

$$\Psi(x, y, t) = \begin{pmatrix} \Psi_A(x, y, t) \\ \Psi_B(x, y, t) \end{pmatrix}$$

is a two component spinor. Here A and B stand for each sublattice index of the bipartite graphene lattice.⁷ To find the eigenstates and eigenenergies we adapt a method developed

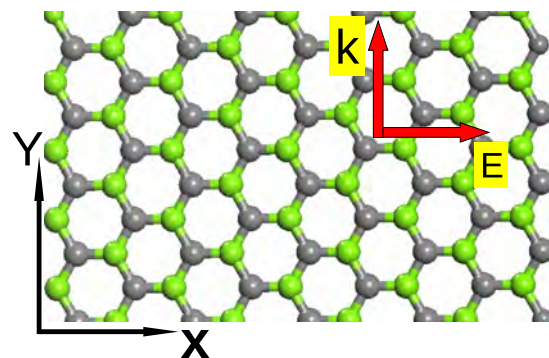


FIG. 1. (Color online) Graphene lattice. Atoms in the A sublattice are shown with different color than those in the B sublattice. The vector \mathbf{k} in which the electromagnetic field propagates and the electric-field vector \mathbf{E} are shown.

by Volkov in 1935 (Ref. 20) to study the movement of relativistic particles under an electromagnetic field. Volkov considered bispinors and Dirac matrices. We use instead Pauli matrices and spinors. First we write the equations of motion for each component of the spinor

$$v_F(\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y)\Psi_B(x,y,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi_A(x,y,t)}{\partial t}, \quad (3)$$

$$v_F(\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y)\Psi_A(x,y,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi_B(x,y,t)}{\partial t}. \quad (4)$$

Considering the magnetic field as \mathbf{B} , the commutation rules for $\hat{\pi}_x$ and $\hat{\pi}_y$ are

$$[\hat{\pi}_i, \hat{\pi}_j] = \frac{i\hbar e}{c} \varepsilon_{ijk} B_k, \quad i, j = x, y, \quad (5)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}, \hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y \right] = -\frac{eE_o}{c} \sin(ky - \omega t), \quad (6)$$

and using that $k_\mu A^\mu = 0$, we find the following equation of motion for the spinor:

$$-\hbar^2 \left[v_F^2 \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \right] + 2i\hbar \xi v_F \cos \phi \frac{\partial \Psi}{\partial x} + [\xi^2 \cos^2 \phi - \xi v_F \hbar \sigma_z k \sin \phi - i\hbar \omega \xi \sigma_x \sin \phi] \Psi = 0, \quad (7)$$

where we have defined the phase ϕ of the electromagnetic wave as $\phi = ky - \omega t$. The parameter ξ is defined as $\xi = \frac{eE_o v_F}{c\omega}$, and σ_μ is the set of Pauli matrices. To solve this equation, we follow Volkov's suggestion to use a trial function that depends upon the phase ϕ of the wave with the following form:

$$\Psi(x,y,t) = e^{ip_x x/\hbar + ip_y y/\hbar - i\epsilon t/\hbar} \mathbf{F}(\phi), \quad (8)$$

where $\epsilon = v_F \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$ and $\mathbf{F}(\phi)$ is a spinor. Inserting Eq. (8) into Eq. (7), it yields an equation for $\mathbf{F}(\phi)$. The resulting differential equation is

$$2i\hbar \epsilon \eta \frac{d\mathbf{F}(\phi)}{d\phi} + [-2\xi v_F p_x \cos \phi - \xi v_F \hbar \sigma_z k \sin \phi + \xi^2 \cos^2 \phi - i\hbar \omega \xi \sigma_x \sin \phi] \mathbf{F}(\phi) = 0, \quad (9)$$

and $\eta = \epsilon\omega - v_F^2 k p_y$. The previous equation can be solved to give

$$\mathbf{F}(\phi) = \exp[G(\phi)] \mathbf{u}, \quad (10)$$

where \mathbf{u} is a two component spinor and,

$$G(\phi) = \frac{i\xi^2}{4\hbar\eta} \phi - \frac{i\xi v_F}{\hbar\eta} p_x \sin \phi - i \frac{\xi v_F \sigma_z k}{2\eta} \cos \phi + \frac{i\xi^2}{8\hbar\eta} \sin 2\phi - \frac{\xi\omega}{2\eta} \sigma_x \cos \phi. \quad (11)$$

In the important case of a field with a long wavelength compared with the system size ($\lambda \rightarrow \infty$), $G(\phi)$ is reduced to

$$G_\infty(t) \equiv \lim_{\lambda \rightarrow \infty} G(\phi) = -\frac{i\xi^2}{4\hbar\epsilon} t - \frac{i\xi v_F}{\hbar\epsilon\omega} p_x \sin \omega t + \frac{i\xi^2}{8\hbar\epsilon\omega} \sin 2\omega t - \frac{\xi}{2\epsilon} \sigma_x \cos \omega t, \quad (12)$$

where ϕ is now equal to ωt . The complete solution is

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \exp[ip_x x/\hbar + ip_y y/\hbar - i\epsilon t/\hbar] \exp[G(\phi)] \mathbf{u}, \quad (13)$$

where \mathbf{u} must be taken as a two component spinor, which satisfies the requirement that when $\mathbf{A} \rightarrow 0$, $\Psi(x,y,t)$ should be the solution of the free Dirac equation to avoid strange solutions. Thus \mathbf{u} is given by

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm e^{-i\varphi/2} \\ e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}, \quad \varphi = \tan\left(\frac{p_y}{p_x}\right), \quad (14)$$

where the plus sign stands for electrons and the minus sign stands for holes. The eigenvalues are $\epsilon + \xi^2 \omega / 4\eta$. But now we need to take into account the time periodicity of the electromagnetic field, which means that the solution must be written in the following way:²¹

$$\Psi = \exp(-i\chi t/\hbar) \Phi(x,y,t), \quad (15)$$

where $\Phi(x,y,t)$ is periodic in time, i.e., $\Phi(x,y,t) = \Phi(x,y,t+T)$, and χ is a real parameter, being unique up to multiples of $\hbar\omega$, $\omega = 2\pi/\tau$. In fact, such property is very well known within the so-called Floquet theory,²¹ developed for time-dependent fields. This time periodicity of the field leads to the formation of bands. Our solution [Eq. (13)] satisfies the requisite form Eq. (15). However, to obtain the Floquet states²¹ for this problem, we need to consider that $\epsilon + \xi^2 \omega / 4\eta$ is unique up to multiples of $\hbar\omega$. Thus $E = \epsilon + \xi^2 \omega / 4\eta + n\hbar\omega$, where n is an integer such that $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, while $\Phi(x,y,t)$ is the Floquet mode given by

$$\Phi(x,y,t) = \exp[in\omega t + ip_x x/\hbar + ip_y y/\hbar] \exp[F(\phi)] \mathbf{u}, \quad (16)$$

where $F(\phi) = G(\phi) + i\xi^2 \omega t / 4\hbar\eta$. The Floquet modes of the problem must satisfy the equation²¹

$$\left[H(x,y,t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \Phi(x,y,t) = E \Phi(x,y,t). \quad (17)$$

The final eigenenergies for electron and holes are the following:

$$E_n(p) = n\hbar\omega \pm v_F \|p\| \pm \left[\frac{e^2 E_0^2 v_F}{4c^2 \omega^2 \|p\| \left[1 - \left(\frac{v_F k p_y}{\omega \|p\|} \right)^2 \right]} \right], \quad (18)$$

where $n=0, \pm 1, \dots$, and the wave function is

$$\Psi_{n,p}(x, y, t) = \exp[-iE_n(p)t/\hbar]\Phi(x, y, t), \quad (19)$$

and $\Phi(x, y, t)$ is the Floquet mode Eq. (16). If the two smallest terms are neglected in Eq. (12), our solution can be reduced to one found in Ref. 22. The spectrum given by Eq. (18) is made of bands, where the electromagnetic field bends the linear dispersion relationship due to the last term. In the important limit of long wavelengths, such term becomes

$$\Delta(p) = \frac{e^2 E_0^2 v_F}{4c^2 \|p\| \omega^2} = \frac{\xi^2}{4\epsilon}. \quad (20)$$

Thus, around the Fermi energy, holes and electron bands are separated by a gap of size $\Delta = 2\Delta(p_F)$. To estimate the magnitude of the gap, we consider electrons near the Fermi energy, thus $\epsilon = v_F \|p\| \approx \epsilon_F$, where ϵ_F is approximately¹² $\epsilon_F = 86$ meV. For a typical microwave frequency $\omega = 50$ GHz with an intensity $E_0 = 3$ V/cm of the electric field, the gap size is around $\Delta \approx 0.2$ meV. Due to the gap opening, the particles are no longer massless. The mass acquired by the carriers due to the field is therefore around $10^{-4} m_e$. Since this is a time-dependent problem, one cannot measure the gap directly from the density of states. Instead, one can look for jumps in the dc conductance, using, for example, the device proposed in Ref. 22. Finally, the solution can be used to evaluate the current using the collisionless Boltzmann equation,¹⁶ neglecting interband transitions. However, this approach turns out to give the same results as considering the velocity of the particles as time dependent while the distribution function $[f_p(t)]$ remains static.²³ Such equivalence is the result of the trivial statement that in the Boltzmann approach, the electric field induces a displacement of the Fermi surface.²³ In fact, the current obtained below is equal to the one obtained using a Boltzmann equation semiclassical approach for graphene under an electric adiabatic field,¹⁶ which also reproduces the intraband Drude conductivity.¹⁶ The electric current is given by $\mathbf{j}(t) = 4S^{-1} \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{j}_{\mathbf{p}}(t) f_{\mathbf{p}}(t)$, where S^{-1} is the sample area and the factor 4 comes for the spin and valley degeneracies. $\mathbf{j}_{\mathbf{p}}(t)$ denotes the contribution to the current of particles with momentum \mathbf{p} at time t . Let us first calculate the μ component of the current vector, given by $j_{\mu, \mathbf{p}}(t) = e v_F \Psi_{n,p}^* \sigma_{\mu} \Psi_{n,p}$. We use Eq. (19) in the long-wavelength limit to obtain the components of j in the x and y directions,

$$j_{x,p}(t) = e v_F \sinh\left(\frac{\xi}{\epsilon} \cos \omega t\right) + \cosh\left(\frac{\xi}{\epsilon} \cos \omega t\right) \cos \varphi, \quad (21)$$

and $j_{y,p} = e v_F \sin \varphi$. In j_x we observe a very important non-linear behavior. In fact, $j_{x,p}(t)$ can be written as a combination of harmonics by using a Fourier series development of the hyperbolic functions²⁴

$$j_{x,p}(t) = e v_F \sum_{s=0}^{\infty} J_{2s+1}\left(\frac{\xi}{\epsilon}\right) \cos[(2s+1)\omega t] + e v_F \left[J_0\left(\frac{\xi}{\epsilon}\right) + 2 \sum_{s=1}^{\infty} J_{2s}\left(\frac{\xi}{\epsilon}\right) \cos(2s\omega t) \right] \cos \varphi, \quad (22)$$

where $J_s(\xi/\epsilon)$ is a Bessel function. Our result is similar to the current obtained using a semiclassical approximation,¹⁶ except for the last term, which eventually cancels out in the thermodynamical limit. Now we include such limit by using the distribution function $f(\mathbf{p})$. In this case, we are dealing with quasiparticles with an effective dispersion relation. Using Eq. (22), and by summing over the phase space we get

$$j_x(t) = \frac{4e v_F}{(2\pi\hbar)^2} \sum_{s=0}^{\infty} A(s) \cos[(2s+1)\omega t],$$

$$A(s) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} J_{2s+1}\left(\frac{\xi}{v_F p}\right) n(p) dp_x dp_y, \quad (23)$$

where $n(p) = [1 + \exp(E_n(p) - \epsilon_F)/k_B T]^{-1}$ is the occupation factor. For $\epsilon_F \gg k_B T$, $n(p)$ can be replaced by a step function. Using Eq. (18), $v_F p_F = \epsilon_F [1 + \sqrt{1 - (\xi/\epsilon_F)^2}] / 2$ for $n=0$, $A(s)$ is

$$A(s) = 2\pi p_F^2 \alpha^2 \int_0^1 J_{2s+1}\left(\frac{Q_0}{\alpha x}\right) x dx,$$

$$\alpha \equiv \left(\frac{(1 + \sqrt{1 - Q_0^2})}{2} \right) \approx \left\{ 1 - \frac{1}{4} Q_0^2 \right\}, \quad (24)$$

where $Q_0 = \xi/\epsilon_F = eE_0/(c\omega p_F)$. For $s=0$ we obtain,

$$A(0) \approx \pi p_F^2 \alpha Q_0 \left[1 + \frac{1}{8} \left(\frac{Q_0}{\alpha}\right)^2 - \frac{1}{576} \left(\frac{Q_0}{\alpha}\right)^4 + \dots \right], \quad (25)$$

and for $s>0$, the integral can be approximated as $A(s) \approx 2\pi p_F^2 (Q_0/2)^3 \Gamma(s - \frac{1}{2}) / \alpha \Gamma(s + \frac{5}{2})$. The first terms of the current are

$$j_x(t) \approx n_e v_F Q_0 \left\{ \left(1 - \frac{1}{8} Q_0^2\right) \cos(\omega t) + \frac{2}{15} Q_0^2 \cos(3\omega t) + \dots \right\},$$

where n_e is the density of electrons $n_e = p_F^2 / \pi \hbar^2$. In conclusion, we solved the Dirac equation for graphene charge carriers under an electromagnetic field.

We acknowledge DGAPA-UNAM Projects No. IN-117806 and No. IN-111906, and CONACyT Grants No. 48783-F and No. 50368.

- ¹K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- ²M. I. Katsnelson, *Mater. Today* **10**, 20 (2007).
- ³K. S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H. L. Stormer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim, and A. K. Geim, *Science* **315**, 1379 (2007).
- ⁴K. S. Novoselov, E. McCann, S. V. Morozov, V. I. Fal'ko, M. I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **2**, 177 (2006).
- ⁵G. W. Semenoff, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449 (1984).
- ⁶K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature (London)* **438**, 197 (2005).
- ⁷J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, *Phys. Rev.* **109**, 272 (1958).
- ⁸P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- ⁹A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Mater.* **6**, 183 (2007).
- ¹⁰G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **76**, 153403 (2007).
- ¹¹N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **73**, 125411 (2006).
- ¹²V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, *Phys. Rev. B* **73**, 245411 (2006).
- ¹³V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, and J. P. Carbotte, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 256802 (2006).
- ¹⁴S. A. Mikhailov and K. Ziegler, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 016803 (2007).
- ¹⁵V. Lukose, R. Shankar, and G. Baskaran, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 116802 (2007).
- ¹⁶S. A. Mikhailov, *Europhys. Lett.* **79**, 27002 (2007).
- ¹⁷S. Das Sarma, E. H. Hwang, and W.-K. Tse, *Phys. Rev. B* **75**, 121406(R) (2007).
- ¹⁸M. I. Katsnelson, *Eur. Phys. J. B* **57**, 225 (2007).
- ¹⁹D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, *Phys. Rev. B* **29**, 1685 (1984).
- ²⁰V. B. Berestetskii, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics*, Course of Theoretical Physics Vol. 4, 2nd ed. (Mir, Moscow, 1982).
- ²¹T. Dittrich, P. Hänggi, G. Ingold, B. Kramer, Gerd Schön, and W. Zwerger, *Quantum Transport and Dissipation* (Wiley, New York, 1998).
- ²²B. Trauzettel, Ya. M. Blanter, and A. F. Morpurgo, *Phys. Rev. B* **75**, 035305 (2007).
- ²³M. Torres and A. Kunold, *Phys. Rev. B* **71**, 115313 (2005).
- ²⁴I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products*, 5th ed. (Academic, San Diego, 1994).

**Erratum: Analytic solution for electrons and holes in graphene under electromagnetic waves:
Gap appearance and nonlinear effects [Phys. Rev. B 78, 201406 (2008)]**

F. J. López-Rodríguez and G. G. Naumis
(Received 17 December 2008; published 15 January 2009)

DOI: [10.1103/PhysRevB.79.049901](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.049901)

PACS number(s): 73.22.-f, 73.21.-b, 81.05.Uw, 99.10.Cd

One term was deleted in Eq. (9), as well as the corresponding discussion. Equation (9) must be corrected as follows:

$$-\hbar^2(v_F^2 k^2 - \omega^2) \frac{d^2 \mathbf{F}(\phi)}{d\phi^2} + 2i\hbar\eta \frac{d\mathbf{F}(\phi)}{d\phi} + [-2\xi v_F p_x \cos \phi - \xi v_F \hbar \sigma_z k \sin \phi + \xi^2 \cos^2 \phi - i\hbar\omega \xi \sigma_x \sin \phi] \mathbf{F}(\phi) = 0. \quad (9)$$

The solution of Eq. (9) has the form $\mathbf{F}(\phi) = \exp(-i\phi B/2A)z(\phi)$, where $z(\phi)$ solves the equation $z''(\phi) + [(C(\phi)/A) - B^2/(4A^2)]z(\phi) = 0$, and $A = -\hbar^2(v_F^2 k^2 - \omega^2)$, $B = 2\hbar\eta$ and $C(\phi) = -2\xi v_F p_x \cos \phi - \xi v_F \hbar \sigma_z k \sin \phi + \xi^2 \cos^2 \phi - i\hbar\omega \xi \sigma_x \sin \phi$. With this correction, our main results are still valid, but now the energy gap and wave function are those of the long-wavelength limit case. This change does not affect the conclusions of the paper.

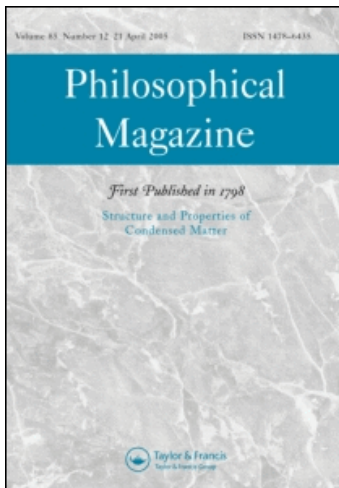
This article was downloaded by: [Inst De Invest En Materiales]

On: 28 June 2010

Access details: Access Details: [subscription number 918619249]

Publisher Taylor & Francis

Informa Ltd Registered in England and Wales Registered Number: 1072954 Registered office: Mortimer House, 37-41 Mortimer Street, London W1T 3JH, UK



Philosophical Magazine

Publication details, including instructions for authors and subscription information:

<http://www.informaworld.com/smpp/title~content=t713695589>

Graphene under perpendicular incidence of electromagnetic waves: Gaps and band structure

F. J. López-Rodríguez^a; G. G. Naumis^a

^a Departamento de Física-Química, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), México D.F., México

Online publication date: 02 June 2010

To cite this Article López-Rodríguez, F. J. and Naumis, G. G.(2010) 'Graphene under perpendicular incidence of electromagnetic waves: Gaps and band structure', *Philosophical Magazine*, 90: 21, 2977 – 2988

To link to this Article: DOI: 10.1080/14786431003757794

URL: <http://dx.doi.org/10.1080/14786431003757794>

PLEASE SCROLL DOWN FOR ARTICLE

Full terms and conditions of use: <http://www.informaworld.com/terms-and-conditions-of-access.pdf>

This article may be used for research, teaching and private study purposes. Any substantial or systematic reproduction, re-distribution, re-selling, loan or sub-licensing, systematic supply or distribution in any form to anyone is expressly forbidden.

The publisher does not give any warranty express or implied or make any representation that the contents will be complete or accurate or up to date. The accuracy of any instructions, formulae and drug doses should be independently verified with primary sources. The publisher shall not be liable for any loss, actions, claims, proceedings, demand or costs or damages whatsoever or howsoever caused arising directly or indirectly in connection with or arising out of the use of this material.

Graphene under perpendicular incidence of electromagnetic waves: Gaps and band structure

F.J. López-Rodríguez and G.G. Naumis*

Departamento de Física-Química, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Apartado Postal 20-364, 01000, México D.F., México

(Received 7 December 2009; final version received 7 March 2010)

We study the energy spectrum for the problem of graphene's carriers under perpendicular incidence of electromagnetic waves. To obtain the spectrum, we solve the Dirac equation under such a field. Then a generalized Mathieu equation is obtained. The limiting cases of strong and weak fields, as well as long and short wavelengths, are analyzed. The energy spectrum is obtained numerically by using the Whittaker method, and a perturbation method is used to obtain the analytical separatrix curve between allowed and forbidden states. The energy spectrum presents bands, and a gap at the Fermi energy. The gap is linear on the electromagnetic wave intensity.

Keywords: graphene; electromagnetic waves; Mathieu equation; gaps

1. Introduction

In the last four and a half years, graphene (a two-dimensional allotrope of carbon) has become the corner-stone of much research [1–3]. Since its discovery in 2004, using the technique called micromechanical cleavage [4], different groups have studied experimentally its properties and potential applications. Graphene, for example, has a breaking strength 200 times greater than steel [5]. With this material, scientists have achieved electron mobilities of $200,000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ by suspending single layer graphene [6]. However, when graphene is set in a substrate, mobilities decrease [7]. The mobilities are now $\sim 4 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ indicating the importance of the choice of substrate. On the other hand, because of these high mobilities, there has been much effort to use graphene in electronic devices. One of the first technological achievements was to make the first single electron transistor [8], and the operation of the first graphene transistor at GHz frequencies [9].

On the theoretical side, much effort has been devoted to understanding the electromagnetic properties of graphene [10–21]. Among this work we can mention the studies of the frequency dependant conductivity [10,11,17,18], the nonlinear electromagnetic response of graphene [19,20], the novel electric field effects [13] and

*Corresponding author. Email: naumis@fisica.unam.mx

the possibility to induce a gap by applying magnetic and electric fields [20,21]. This effect can also be induced by doping graphene [22], and its prediction has been confirmed very recently [23].

In previous work, we studied the problem of graphene irradiated by electromagnetic waves [20]. We showed that graphene takes an incoming electrical signal of determinate frequency and produces an output signal whose frequency is a multiple of the original one. Therefore graphene can work as a frequency multiplier. Recently the materialization of this idea was achieved at the Massachusetts Institute of Technology where David Chandler and collaborators built the first experimental graphene frequency multiplier [24]. However, in our previous derivation, the solution contained a very rough approximation, since the second derivative of the field was neglected [20]. Here we provide a solution that avoids this problem, and solves the inconsistencies of the previous solution. Furthermore, in our previous work we only considered the case of electromagnetic radiation with a wavevector in the graphene plane. In most of the experimental situations, the radiation has normal incidence to the graphene. For example, this is the case for most of the optical properties. In this paper, we continue the research into graphene interacting with radiation, but now we consider the important case of a graphene layer irradiated with perpendicular incidence of an electromagnetic plane wave. By solving a new kind of generalized Mathieu equation, we obtain the spectrum of energies, which presents bands and gaps. In the limit of high frequencies or small fields, the gap is at the Fermi energy and thus can influence the transport properties.

The paper is organized as follows. In Section 2, we show how to model the interaction between the electric field and the sample of graphene. We find three important limiting cases to analyze, corresponding to interesting experimental situations. In Section 3 we study in detail all the limiting cases; in Section 4 the conclusion are given; and the details of the calculations are summarized in the appendixes.

2. Modelling graphene under a perpendicular electromagnetic field

For graphene, it has been shown that the Hamiltonian for wavevectors close to the K point of the first Brioullin zone can be written as [25],

$$H(x, y, t) = v_F \begin{pmatrix} \epsilon_0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & \epsilon_0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

where v_F is the Fermi velocity $v_F \approx c/300$, with c the light speed. ϵ_0 is the zero point energy, $\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c$ with $\hat{\mathbf{p}}$ being the electron momentum operator, and \mathbf{A} is the vector potential of the applied electromagnetic field, given by $\mathbf{A} = (\frac{E_0}{\omega} \cos(kz - \omega t), 0)$. E_0 is the amplitude of the electric field and ω is the frequency of the wave. E_0 can be taken as a constant since screening effects are weak in graphene [26]. The dynamics of charge carriers in graphene is governed by the Dirac equation [25],

$$H(x, y, t)\Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t}, \quad (2)$$

where,

$$\Psi(x, y, t) = e^{-ie_0t/\hbar} \begin{pmatrix} \Psi_A(x, y, t) \\ \Psi_B(x, y, t) \end{pmatrix}, \tag{3}$$

is a two component spinor. Here A and B stand for each sublattice index of the bipartite graphene lattice [27]. Inserting Equation (3) into Equation (2) we obtain,

$$v_F(\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y)\Psi_B(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi_A(x, y, t)}{\partial t}, \tag{4}$$

$$v_F(\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y)\Psi_A(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi_B(x, y, t)}{\partial t}. \tag{5}$$

The commutation rules for $\hat{\pi}_x$, $\hat{\pi}_y$ and $\partial/\partial t$ are in this case,

$$[\hat{\pi}_i, \hat{\pi}_j] = 0, \quad i, j = x, y \tag{6}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}, \hat{\pi}_x \pm i\hat{\pi}_y \right] = -\frac{eE_0}{c} \sin(kz - \omega t). \tag{7}$$

Using these commutation rules and Equations (4) and (5), we find the following equation of motion for the spinor under the electromagnetic field,

$$-\hbar^2 \left(v_F^2 \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \right) + 2i\hbar\xi v_F \cos \phi \frac{\partial \Psi}{\partial x} + [\xi^2 \cos^2 \phi - i\hbar\omega\xi\sigma_x \sin \phi] \Psi = 0, \tag{8}$$

where we have defined the phase ϕ of the electromagnetic wave as $\phi = kz - \omega t$. The parameter ξ is defined as,

$$\xi = \frac{eE_0 v_F}{c\omega}, \tag{9}$$

and σ_μ is the set of Pauli matrices. For nearly flat graphene, we can put $z = 0$, and the last equation becomes,

$$-\hbar^2 \left(v_F^2 \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \right) + 2i\hbar\xi v_F \cos(\omega t) \frac{\partial \Psi}{\partial x} + [\xi^2 \cos^2(\omega t) - i\hbar\omega\xi\sigma_x \sin(\omega t)] \Psi = 0. \tag{10}$$

Consider a solution of the following form,

$$\Psi(x, y, t) = e^{ip_x x/\hbar + ip_y y/\hbar} \mathbf{F}(\omega t), \tag{11}$$

where $\mathbf{F}(\omega t)$ is a spinor. By inserting Equation (11) into Equation (10), it yields an equation for $\mathbf{F}(\omega t)$. The resulting differential equation is,

$$\mathbf{F}''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} + \frac{1}{(\hbar\omega)^2} [\xi^2 \cos^2(\omega t) - 2\xi v_F p_x \cos(\omega t)] - \frac{i\xi}{\hbar\omega} \sigma_x \sin(\omega t) \right\} \mathbf{F}(\omega t) = 0, \tag{12}$$

where $\epsilon = v_F \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$. This equation is in fact a set of two coupled differential equations; its solution gives the answer to the problem. The general solution of this equation can be performed by using a method similar to the one presented in Appendix 1. However, the solution is very difficult and here we prefer to present three important limiting cases. One is $\xi = 0$, which serves to check the equation. The others concern the experimental situations $\xi/\hbar\omega \gg 1$ and $\xi/\hbar\omega \ll 1$. Since,

$$\frac{\xi}{\hbar\omega} = \frac{v_F e E_0}{c \hbar\omega^2} \approx \frac{1}{300} \frac{e E_0}{\hbar\omega^2}, \quad (13)$$

the first case $e E_0/\hbar\omega^2 \gg 300$ corresponds to strong electric fields or long wavelengths, while the case $e E_0/\hbar\omega^2 \ll 300$ corresponds to weak electric fields or short wavelengths. We must mention that our approach breaks down for very strong electromagnetic fields or high frequencies, since the original tight-binding Hamiltonian can be modified in a substantial way. The limiting frequency for using the Dirac model is around [28] $\omega \sim 4 \times 10^{15}$ Hz. Having these considerations in mind, let us explore the nature of the solutions in the following section.

3. Approximate solutions

3.1. No electric field

The first case is when $\xi = 0$; this means that there is no interaction between charge carriers and the electromagnetic wave, thus we have free particles in the graphene sheet. The equation for $\mathbf{F}(\omega t)$ is

$$\mathbf{F}''(\omega t) + \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} \mathbf{F}(\omega t) = 0 \quad (14)$$

whose solution is

$$\mathbf{F}(\omega t) = e^{\pm i\epsilon t/\hbar} \mathbf{u}. \quad (15)$$

This last equation is the solution of the free particle problem as it should be. Here \mathbf{u} is a spinor that can be written as

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm e^{-i\varphi/2} \\ e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}, \quad \varphi = \tan\left(\frac{p_y}{p_x}\right),$$

where the plus and minus sign stand for electrons and holes, respectively.

3.2. Intense electric fields or long wavelengths ($e E_0/\hbar\omega^2 \gg 300$)

In this case $\xi/\hbar\omega \gg 1$, and thus in Equation (12) we can neglect linear terms in $\xi/\hbar\omega$. Also, in what follows we take $p_x = 0$, which is basically an initial condition, in order to simplify the equations, although the general case can be solved in a similar way. The following equation is obtained for $\mathbf{F}(\omega t)$,

$$\mathbf{F}''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} + \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \xi^2 \cos^2(\omega t) \right\} \mathbf{F}(\omega t) = 0. \quad (16)$$

Using the relation $\cos^2(\omega t) = \frac{1}{2}(1 + \cos(2\omega t))$ we can write,

$$\mathbf{F}''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} + \frac{\xi^2}{(\hbar\omega)^2} \left[\frac{1}{2}(1 + \cos(2\omega t)) \right] \right\} \mathbf{F}(\omega t) = 0,$$

and defining,

$$q = -\frac{\xi^2}{4(\hbar\omega)^2}, \tag{17}$$

and,

$$a = \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} - 2q, \tag{18}$$

we obtain the equation

$$\frac{d^2\mathbf{F}(\omega t)}{d(\omega t)^2} + (a - 2q \cos(2\omega t))\mathbf{F}(\omega t) = 0, \tag{19}$$

which is a set of two uncoupled Mathieu equations in standard form. According to Floquet’s theory, the solution of Equation (19) has the form [29],

$$F(\omega t) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} C_{2r}(\mu; a, q)e^{(\mu+2ri)\omega t}, \tag{20}$$

where $C_{2r}(\mu; a, q)$ are Fourier coefficients. Furthermore, using the Whittaker method, in Appendix 1 we show that the allowed values of μ are given by,

$$\mu = \frac{1}{\pi} \cos^{-1}(1 - \Delta_r(0; a, q)(1 - \cos \pi\sqrt{a})) \quad a \geq 0, \tag{21}$$

and

$$\mu = \frac{1}{\pi} \cos^{-1}(1 - \Delta_r(0; a, q)(1 - \cosh \pi\sqrt{a})) \quad a < 0. \tag{22}$$

where $\Delta_r(0; a, q)$ is a determinant defined in Appendix 1, which can be calculated using the recursive Strang method [29].

In Figure 1 we present the energy spectrum obtained from Equations (21) and (22), in which the gray regions are the allowed values of the energy. This diagram is the spectrum of the usual Mathieu equation. However, in the present case there is an extra constraint that relates a with q due to Equation (18). For fixed energies ϵ , this condition is equivalent to drawing a set of parallel lines in Figure 1. Since $(\epsilon/\hbar\omega)^2$ is always positive, in Figure 1 we plot the line $a = -2q$, which divides the spectrum into two zones. Energies on the left side of this line are not allowed, while the values on the right side are allowed. States over this line have $\epsilon = 0$. Notice that for a fixed electric field, q is a constant. Thus, to ‘read’ the spectrum for a given field, one must draw a vertical line at fixed q . Using this method, a simple analysis of Figure 1 reveals bands separated by energy gaps.

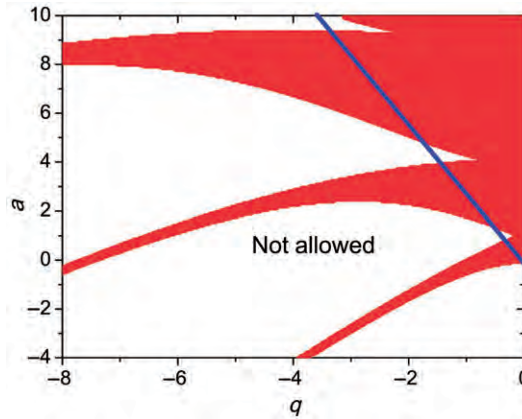


Figure 1. Energy spectrum for the case of intense electric fields or long wavelengths. A line divides the spectrum into two regions; one of them is allowed while the other is forbidden due to Equation (18).

3.3. Weak electric field or short wavelengths ($eE_0/\hbar\omega^2 \ll 300$)

Under this limit, in Equation (12) we can neglect quadratic terms in $\xi/\hbar\omega$ to obtain the following equation for $\mathbf{F}(\omega t)$,

$$\mathbf{F}''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} - \frac{1}{\hbar\omega} i\xi\sigma_x \sin(\omega t) \right\} \mathbf{F}(\omega t) = 0. \tag{23}$$

Equation (23) is a set of two coupled equations. To decouple these equations, we proceed in the following way. First we write both equations explicitly,

$$F_1''(\omega t) + \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} F_1(\omega t) - \frac{i\xi}{\hbar\omega} \sin(\omega t) F_2(\omega t) = 0, \tag{24}$$

$$F_2''(\omega t) + \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} F_2(\omega t) - \frac{i\xi}{\hbar\omega} \sin(\omega t) F_1(\omega t) = 0. \tag{25}$$

If we add both equations, we obtain,

$$u''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} - \frac{1}{\hbar\omega} i\xi \sin(\omega t) \right\} u(\omega t) = 0, \tag{26}$$

where $u(\omega t) = F_1(\omega t) + F_2(\omega t)$, while if we subtract them, the following equation is obtained,

$$v''(\omega t) + \left\{ \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} + \frac{1}{\hbar\omega} i\xi \sin(\omega t) \right\} v(\omega t) = 0, \tag{27}$$

where $v(\omega t) = F_1(\omega t) - F_2(\omega t)$. For this case, we define new values for a and q ,

$$a = \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2}, \tag{28}$$

and,

$$q = \frac{\xi}{2\hbar\omega}, \tag{29}$$

therefore we can write,

$$u''(\omega t) + \{a - 2iq \sin(\omega t)\}u(\omega t) = 0, \tag{30}$$

$$v''(\omega t) + \{a + 2iq \sin(\omega t)\}v(\omega t) = 0. \tag{31}$$

Let us make the following change of variable $\phi' = \omega t/2$. By inserting this new variable in Equation (30), we obtain

$$u''(2\phi') + (A - 2iQ \sin 2\phi')u(2\phi') = 0 \tag{32}$$

where $A = 4a$ and $Q = 4q$. Notice that the equation for $v(\omega t)$ is obtained by the replacement of q by $-q$. Thus, we only need to solve Equation (32) for $q < 0$ and $q > 0$.

To find the spectrum of allowed energies, we follow a procedure similar to the one that we used for the case of intense electric fields. The main difference is that now Q is multiplied by the imaginary number i . In this case, we can still use the Floquet solution, and thus the spectrum is found by using Equations (21) and (22). However, $\Delta_r(0; a, q)$ is changed since the recursion relations are modified, as shown in Appendix 1.

Figure 2 shows the resulting energy spectrum. The gray zones are the allowed energy values, and again we obtain a series of bands. In the same plot we also present the contour curves corresponding to the same μ as given by Equation (21). This numerical result can be compared with a theoretical result by using perturbation theory, as shown in Appendix 2. In particular, in Appendix 2 we show that the separatrix between allowed and non-allowed states is given by,

$$A \approx \frac{1}{2}Q^2. \tag{33}$$

To compare the theoretical separatrix curve and the numerical transition curve at the origin, we calculated the curvature of the theoretical curve performing the second derivative of Equation (33). The theoretical result is 1 for the curvature, while the numerical result is 1.1.

The most important thing to notice in Figure 2 is that an energy gap appears near the Fermi energy ($\epsilon = 0$). As explained in Figure 3, where an amplification of the region around the origin is presented, for a given electric field, the minimal value of ϵ is determined by the separatrix curve. In fact, since the separatrix curve is given by $a \approx 2q^2$, and using Equations (28) and (29), we obtain the minimal allowed value of ϵ ,

$$\epsilon \approx \pm \frac{\xi}{\sqrt{2}} \tag{34}$$

which produces a gap of size:

$$\Delta \approx \frac{\sqrt{2}ev_F E_0}{c\omega}. \tag{35}$$

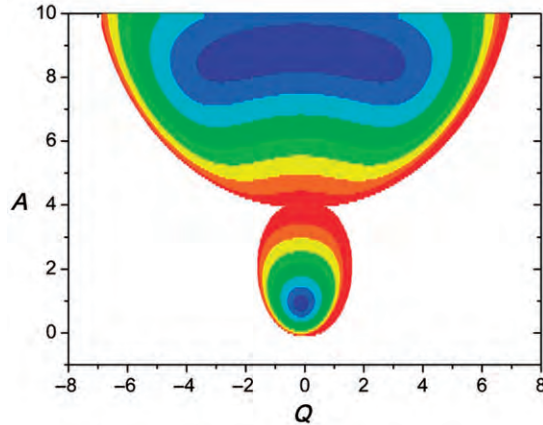


Figure 2. (Color online). Energy spectrum for the case of weak electric fields or short wavelengths. The gray zones are allowed energy values. Contours denote curves of the same μ .

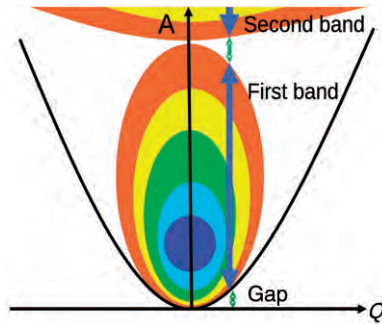


Figure 3. (Color online). Amplification of the energy spectrum for the case of weak electric fields around $\epsilon=0$. For a fixed field (Q constant), the figure shows two energy gaps and two energy bands near the Fermi energy. The separatrix curve $A=Q^2/2$ obtained from perturbation theory (Appendix 2), which determines the minimal value of ϵ , is also shown.

Let us estimate this quantity, for a microwave frequency $\omega=50$ GHz with an intensity $E_0=1$ V/m of the electric field, where the gap size is $\Delta \approx 0.03$ meV.

It is also worthwhile mentioning a second interesting prediction from Equation (33). One can observe that the spectrum is made mainly from stacked ellipses that grow in size, as seen in Figure 3. For $Q < 1.48$, the spectrum has two gaps, one around $A=0$ and the other at $A=4$. However, for $Q > 1.48$ both gaps merge and the first band disappears. Such a field is given by,

$$E_0 = \frac{1.48(c\hbar\omega^2)}{2ev_F},$$

for a typical microwave frequency $\omega=50$ GHz. This value corresponds to a field of $E_0=1.797$ V/m.

4. Conclusions

In conclusion, we have found an equation that describes the interaction between charge carriers in graphene under electromagnetic radiation. By solving this equation we found the energy spectrum for intense electric fields and weak electric fields, as well as for short and long wavelengths. The main features of the spectra is that a gap is open near the Fermi energy. Thus, the conductivity can be controlled by applying an electromagnetic wave, which is an effect that could be useful to build electronic gates. Our analytical solution could also be useful to understand the optical properties of graphene.

Acknowledgements

We thank CONACyT 48783-F, 50368 and DGAPA-UNAM project IN 100310-3. Calculations were carried at the KanBalam Supercomputer of UNAM.

References

- [1] A.K. Geim and K.S. Novoselov, *Nature Mater.* 6 (2007) p.183.
- [2] A.H. Castro-Neto, *Nature Mater.* 6 (2007) p.179.
- [3] A.H. Castro-Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov and A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* 81 (2009) p.109.
- [4] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva and A.A. Firsov, *Science* 306 (2004) p.666.
- [5] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar and J. Hone, *Science* 321 (2008) p.385.
- [6] K.I. Bolotin, K.J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim and H.L. Stormer. Available at <http://arxiv.org/abs/0802.2389>.
- [7] J.H. Chen, C. Jang, S. Xiao, M. Ishigami and M. Fuhrer, *Nature Nanotech.* 3 (2008) p.206.
- [8] L.A. Ponomarenko, F. Schedin, M.I. Katnelson, R. Yang, E.W. Hill, K.S. Novoselov and A.K. Geim, *Science* 320 (2008) p.356.
- [9] Y.M. Lin, K.A. Jenkins, A. Valdes García, J.P. Small, D.B. Farmer and P. Avouris. Available at <http://arxiv.org/abs/0812.1586v1>.
- [10] V.P. Gusynin and S.G. Sharapov, *Phys. Rev. B* 73 (2006) p.245411.
- [11] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov and J.P. Carbotte, *Phys. Rev. Lett.* 96 (2006) p.256802.
- [12] S.A. Mikhailov and K. Ziegler, *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007) p.016803.
- [13] V. Lukose, R. Shankar and G. Baskaran, *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007) p.116802.
- [14] B. Trauzettel, Ya.M. Blanter and A.F. Morpurgo, *Phys. Rev. B* 75 (2007) p.035305.
- [15] S. Krompiewski, *Phys. Rev. B* 80 (2009) p.075433.
- [16] Y.M. Zuev, W. Chang and P. Kim, *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009) p.096807.
- [17] N.M.R. Peres, F. Guinea and A.H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* 73 (2006) p.125411.
- [18] L.A. Falkovsky and A.A. Varlamov. Available at <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0606800>.
- [19] S.A. Mikhailov, *Europhys. Lett.* 79 (2007) p.27002.
- [20] F.J. López Rodríguez and G.G. Naumis, *Phys. Rev. B* 78 (2008) p.201406.
- [21] I. Synam, *Phys. Rev. B* 80 (2009) p.054303.
- [22] G.G. Naumis, *Phys. Rev. B* 76 (2007) p.153403.
- [23] A. Bostwick, J.L. McChesney, K. Emtsev, T. Seyller, K. Horn, S.D. Kevan and E. Rotenberg, *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009) p.056404.
- [24] D. Chandler. Available at www.physorg.com/news156698836.html.

- [25] G.W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. 53 (1984) p.2449.
- [26] D.P. DiVicenzo and E.J. Mele, Phys. Rev. B 29 (1984) p.1685.
- [27] J.C. Slonczewski and P.R. Weiss, Phys. Rev. 109 (1958) p.272.
- [28] M. Lewkowicz and B. Rosenstein, Phys. Rev. Lett. 102 (2009) p.106802.
- [29] J.A. Strang. Available at http://arxiv.org/PS_cache/math-ph/pdf/0510/0510076v2.pdf.
- [30] E.T. Whittaker and G.N. Watson, *A Course Of Modern Analysis*, 4th ed., The Macmillan Company, New York, 1962.
- [31] A.H. Nayfeh and D.T. Mook, *Nonlinear Oscillations*, John Wiley, New York, 1979.

Appendix 1

Here we provide the method used to find the energy spectrum of Equation (19). The energy spectrum for the complex case of q , given by Equation (32), can be found in a similar way.

If Equation (20) is inserted into Equation (19) the following recurrence relation is obtained,

$$C_{2r} + \frac{q}{(2r - \mu i)^2 - a} (C_{2r+2} + C_{2r-2}) = 0.$$

Defining

$$\gamma_{2r} = \frac{q}{(2r - \mu i)^2 - a}, \quad \forall r \in \mathbb{Z},$$

we obtain the following matrix,

$$\theta_r(\mu, a, q) = \begin{pmatrix} 1 & \gamma_{2r} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma_{2r-2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \gamma_0 & 1 & \gamma_0 & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \gamma_{-2r+2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma_{-2r} & 1 \end{pmatrix}.$$

Finding non-trivial solutions of Equation (19) is equivalent to demanding,

$$\det(\theta_r(\mu; a, q)) = \Delta_r(\mu; a, q) = 0;$$

besides this give us the spectrum of energies. We are going to use a method proposed by Whittaker [30] for finding μ as a function of a and q .

Let us introduce the following quantity [30],

$$\lambda = \frac{1}{\cos(\pi i \mu) - \cos(\pi \sqrt{a})}.$$

This quantity has the same poles that $\det(\Delta_r(\mu; a, q)) = 0$ has. Besides,

$$\lim_{\mu \rightarrow \pm\infty} \lambda \sim \lim_{\mu \rightarrow \pm\infty} \frac{1}{e^{\pi\mu}} \rightarrow 0 \tag{36}$$

Therefore defining,

$$\eta = \Delta_r(\mu; a, q) - k\lambda, \tag{37}$$

we have that when $\mu \rightarrow \pm\infty$, η is bounded since,

$$\lim_{\mu \rightarrow \pm\infty} \eta = 1. \tag{38}$$

Downloaded By: [Inst De Invest En Materiales] At: 18:08 28 June 2010

This result is a consequence of Equation (36) and the following fact,

$$\lim_{\mu \rightarrow \pm\infty} \Delta_r(\mu; a, q) = 1. \tag{39}$$

Invoking Liouville’s theorem due to the asymptotic behavior given by Equation (38), we have that

$$k = \frac{\Delta_r(\mu; a, q) - 1}{\lambda} \tag{40}$$

must be a constant. Now we evaluate k for a particular $\Delta_r(\mu; a, q)$, for example at $\mu = 0$. Thus

$$k = (\Delta_r(0; a, q) - 1)(1 - \cos \pi\sqrt{a}). \tag{41}$$

Using Equations (40) and (41) we obtain

$$\frac{\Delta_r(\mu; a, q) - 1}{\lambda} = (\Delta_r(0; a, q) - 1)(1 - \cos \pi\sqrt{a}).$$

For our purposes $\Delta_r(\mu; a, q) = 0$, and therefore

$$\mu = \frac{1}{\pi} \cos^{-1}(1 - \Delta_r(0; a, q)(1 - \cos \pi\sqrt{a})) \quad a \geq 0 \tag{42}$$

and

$$\mu = \frac{1}{\pi} \cos^{-1}(1 - \Delta_r(0; a, q)(1 - \cosh \pi\sqrt{a})) \quad a < 0. \tag{43}$$

However, to plot the spectrum, the value of $\Delta_r(0; a, q)$ is missing. To evaluate this infinite determinant, we can use the recursive Strang method [29], which produces the following relation,

$$\Delta_r(0) = \beta_{2r}\Delta_{r-1}(0) - \alpha_{2r}\beta_{2r}\Delta_{r-2}(0) + \alpha_{2r}\alpha_{2r-2}^2\Delta_{r-3}(0),$$

where $\alpha_{2r} = \gamma_{2j}\gamma_{2j-2}$ and $\beta_{2r} = 1 - \alpha_{2r}$.

To solve the case of weak fields or short wavelengths, which is given by Equation (32), we need to consider that q is replaced by a complex iq in Equation (19). All the steps are similar to the real q case. However, the recurrence relation for $\Delta_r(0; a, q)$ is changed to,

$$\Delta_r(0) = \beta_{2r}\Delta_{r-1}(0) + \alpha_{2r}\beta_{2r}\Delta_{r-2}(0) - \alpha_{2r}\alpha_{2r-2}^2\Delta_{r-3}(0), \tag{44}$$

where $\alpha_{2r} = \gamma_{2j}\gamma_{2j-2}$ and $\beta_{2r} = 1 + \alpha_{2r}$.

Appendix 2

To find the separatrix between allowed and non-allowed states in Equation (30), we rewrite the equation as,

$$u''(2\phi') + (A - 2iQ\text{sen}2\phi')u(2\phi') = 0, \tag{45}$$

where we have made the change of variable $\omega t/2 = \phi'$. Thus $A = 4a$ and $Q = 4q$. We seek solutions to Equation (45) in the form of the following perturbation expansions [31],

$$u(2\phi'; Q) = u_0(2\phi') + Qu_1(2\phi') + Q^2u_2(2\phi') + \dots \tag{46}$$

$$A = A_0 + QA_1 + Q^2A_2 + \dots \tag{47}$$

Downloaded By: [Inst De Invest En Materiales] At: 18:08 28 June 2010

Substituting Equations (46) and (47) into Equation (45) and equating coefficients of like powers of Q , we obtain,

$$u_0'' + A_0 u_0 = 0, \quad (48)$$

$$u_1'' + A_0 u_1 = -A_1 u_0 + 2iu_0 \sin 2\phi', \quad (49)$$

$$u_2'' + A_0 u_2 = -A_2 u_0 - A_1 u_1 + 2iu_1 \sin 2\phi'. \quad (50)$$

Here we treat the case $A_0 = 0$. In this case $u_0 = \alpha$, α is a constant. Equation (49) becomes,

$$u_1'' = -A_1 \alpha + 2i\alpha \sin 2\phi'. \quad (51)$$

In order to make u_1 periodic, we set $A_1 = 0$. Then the solution of Equation (51) is,

$$u_1 = -\frac{1}{2}i\alpha \sin 2\phi'. \quad (52)$$

Substituting u_0 and u_1 into Equation (50) yields,

$$u_2'' = -A_2 \alpha + \alpha \sin^2 2\phi', \quad (53)$$

thus,

$$u_2'' = -A_2 \alpha + \frac{\alpha}{2}(1 - \cos 4\phi'). \quad (54)$$

To ensure that u_2 is periodic, we let $A_2 = \frac{1}{2}$. Hence the separatrix curve emanating from the origin is given by

$$A = \frac{1}{2}Q^2 + O(Q^3), \quad (55)$$

and the wave function obtained after solving Equation (54) is

$$u = \alpha \left(1 - \frac{iQ}{2} \sin 2\phi' + \frac{Q^2}{32} \cos 4\phi' + \dots \right). \quad (56)$$