



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

CÁLCULO DEL PROPAGADOR FERMIÓNICO
PARA EL ESTUDIO DE PROPIEDADES
ELECTROMAGNÉTICAS DE MULTICAPAS
DE GRAFENO

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

Maestro en Ciencias (Física)

PRESENTA:

Fís. Ricardo Zavaleta Madrid

DIRECTOR DEL TRABAJO:

Dra. Gabriela Murguía Romero
Facultad de Ciencias UNAM

COMITÉ TUTOR:

Dr. Manuel Torres Labansat
Instituto de Física UNAM

Dr. Rodolfo Patricio Martínez y Romero
Facultad de Ciencias UNAM



Ciudad de México, mayo de 2016



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.

*A Mariana, el amor de mi vida
Santiago y Marina que iluminaron mi vida.*

Agradecimientos

Este trabajo de tesis no pudo ser posible sin el apoyo de la Dra. Gabriela Murguía Romero, mentora a la cual le agradezco todas sus enseñanzas durante los últimos años.

Agradezco al Dr. Angel Sánchez Cecilio, ya que con su colaboración el proyecto tomó un nuevo aire. Su experiencia y energía logro sacar lo mejor de mí.

A mi comité tutor, formado por el Dr. Manuel Torres Labansat y el Dr. Rodolfo Martínez y Romero que me apoyaron durante toda la maestría.

Al comité sinodal, Dr. Alfredo Raya Montaña, Dra. María Elena Tejeda Yeomans, Dr. Chumin Wang Chen y Dr. Juan Carlos D'Olivo Sáenz, por revisar mi trabajo en los tiempos establecidos y darme sus comentarios de manera clara, ayudando a terminar mi proceso de aprendizaje.

A todos mis compañeros de la maestría con los que compartí e intercambié conocimientos por todo el trabajo que juntos logramos.

A mi familia, a mis padres y hermanos por apoyarme en todo lo que estaba en sus manos, gracias por darme ánimo.

A la luz de mi vida, gracias pekosa, por dame todos esos momentos de felicidad y por apoyar este proyecto en las buenas y en las malas. Por todo tu apoyo y todo el tiempo dedicado en este proyecto de ambos.

Este trabajo fue apoyado por el proyecto UNAM-PAPIIT IA105415 y por la beca de Maestría del CONACYT.

Índice general

Introducción	7
1. Estructura Cristalina del Grafeno	13
1.1. Monocapa	14
1.2. Bicapa	22
1.3. Multicapa	29
2. Multicapas de Grafeno con SUSY-QM	39
2.1. SUSY-QM	39
2.2. Multicapa con SUSY-QM	43
3. Propagador Fermiónico	57
3.1. Propagador no relativista	58
3.2. Propagador fermiónico de la partícula libre	60

3.2.1. Segunda cuantización del campo de Dirac	63
3.2.2. Propagador libre del campo de Dirac	65
3.3. Propagador con campo magnético uniforme	67
4. Propagador con Campo Magnético y Eléctrico Uniformes	79
4.1. Cálculo del propagador	80
4.2. Aplicaciones	88
Conclusiones	91
A. Modelo del Grafeno con Campo Magnético	95
B. Verificación del Propagador	101
Bibliografía.....	105

Introducción

La capacidad que la humanidad ha alcanzado para poder manipular átomo a átomo, capa por capa, de la estructura de diversos materiales, ha permitido a su vez, la creación y estudio de nuevos materiales, incluso materiales que ni la misma naturaleza puede crear, como el siliceno [1]. En particular el grafeno es un material que ha inspirado diversas manipulaciones de estructuras de un átomo de grosor [2]. El grafeno fue descubierto y sintetizado por Andre Geim y Konstantin Novoselov, los cuales ganaron el premio Nobel de Física en el año 2010. Ellos descubrieron principalmente que el grafeno es un material bidimensional, pero también que tiene una dureza 200 veces superior a la del acero, es flexible y tiene buena conductividad térmica y eléctrica [3].

El grafeno se forma de átomos de carbono, que es el cuarto material más abundante en la Tierra. Por todas sus propiedades, es un buen candidato para sustituir al silicio en componentes electrónicos [4], sin embargo, falta desarrollar tecnología para que se pueda utilizar para dichos fines, ya que su estructura tiene complicaciones técnicas para ser producido a escala industrial [3], [5].

Es importante mencionar que el grafeno tiene uso en la humanidad desde hace más de cinco siglos, en el grafito, aunque solo hasta ahora es que se ha demostrado que todos los alótropos del carbono (grafito, diamante, carbono mineral) son formados por el grafeno y este puede formar nuevas estructuras como los nanotubos de carbono y los fullerenos (ver Fig. 1).

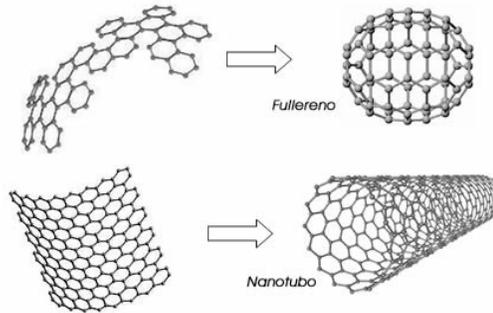


Figura 1: Alótropos de carbono formados por el grafeno [6].

Las aplicaciones son múltiples: en celdas solares ligeras, pantallas táctiles flexibles, transistores de efecto de campo sin silicio, baterías que no contaminen e incluso implantes de grafeno para uso bioelectrónico, como en el ojo simulando una retina [7].

Los portadores de carga en el grafeno son electrones del orbital s de la estructura sp^2 del carbono, los cuales pueden considerarse como relativistas ya que pueden describirse mediante la ecuación de Dirac. Por cada portador de carga en cada una de las subredes triangulares en las que se divide la red cristalina del grafeno, puede utilizarse cada una de las representaciones irreducibles de las matrices de Dirac. La velocidad de los portadores de carga en el grafeno es $v_F \approx 10^6 m/s$,

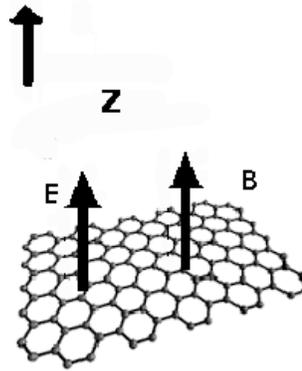


Figura 2: Campos \mathbf{E} y \mathbf{B} perpendiculares a los planos del grafeno.

lo cual es un centésimo de la velocidad de la luz [8].

El sistema de estudio en este trabajo es la multicapa de grafeno dispuesta en apilamiento ABC (romboédrica), sometida a campo magnético y eléctrico en la dirección perpendicular a los planos de grafeno (ver Fig. 2). Se calculará el propagador fermiónico de los portadores de carga, el cual permite conocer la dinámica del transporte de carga a través de coeficientes de respuesta, como lo es la conductividad eléctrica.

El interés de introducir el campo eléctrico perpendicular al plano de las capas de grafeno, es debido a que existe evidencia experimental [9] de que esta configuración induce la apertura de la brecha de conducción en una multicapa de grafeno. Por otro lado, existen resultados teóricos [10] que muestran que al introducir el campo eléctrico en esta dirección, para la tricapa de grafeno la brecha es máxima, mientras que para una multicapa formada por 4 capas o más de grafeno la

brecha decae monótonamente.

Con esta configuración de campo eléctrico en el apilamiento ABA se produce un traslape entre bandas acompañado de un apantallamiento lineal a los portadores de carga, mientras que para el apilamiento ABC el efecto del campo produce una apertura de la brecha de conducción, causando un apantallamiento no lineal [11]. Es por ello que se trabajará con este último tipo de apilamiento.

Los Hamiltonianos efectivos que describen la dinámica de los portadores de carga de la multicapa de grafeno (escritos en términos de las representaciones irreducibles de las matrices de Dirac) pueden resolverse mediante las propiedades supersimétricas de la mecánica cuántica (SUSY-QM) en términos de las soluciones del Hamiltoniano de una sola capa de grafeno (monocapa). Por ello, es posible concentrarse sólo en el cálculo del propagador de los portadores de carga en una sola capa de grafeno. A través del formalismo SUSY-QM puede obtenerse el propagador correspondiente para los portadores de carga en la multicapa de grafeno.

En este trabajo se calcula el propagador fermiónico del grafeno mediante el producto temporalmente ordenado de los campos asociados a los portadores de carga, disponiendo la información en el siguiente orden:

- En el primer capítulo se presenta la estructura del grafeno, empezando por la monocapa, la cual es descrita por la ecuación de Dirac a través de una aproximación del Hamiltoniano del sistema a primeros vecinos. Al agregar capas, la aproximación permite describir al sistema con un Hamiltoniano efectivo que tiene la estructura de la ecuación de Dirac pero con

el operador de momento aplicado J veces, donde J es el número de capas apiladas en la multicapa descrita.

- En el segundo capítulo se obtiene la solución del Hamiltoniano efectivo de la multicapa de grafeno mediante el formalismo de la supersimetría en mecánica cuántica (SUSY-QM) para así reducir las soluciones de la multicapa a un problema que solo necesite las soluciones de la monocapa.
- En el capítulo 3 se plantea la metodología que se utilizará para obtener el resultado principal de esta tesis. Se presentan los antecedentes teóricos para la construcción del propagador fermiónico, empezando desde el caso no relativista, hasta el caso de la teoría cuántica de campos con la segunda cuantización. La metodología general consiste en el cálculo del propagador de la partícula libre y con campo magnético uniforme perpendicular al plano del grafeno, calculando primero las soluciones de la ecuación de Dirac, para posteriormente, con el producto temporalmente ordenado obtener el propagador. En el caso de campo magnético uniforme las soluciones son expresadas en términos de las funciones de Ritus, las cuales diagonalizan el operador de momento.
- En el cuarto y último capítulo se presenta el resultado principal de esta tesis. Se obtienen las soluciones de la ecuación de Dirac para calcular el propagador mediante el producto temporalmente ordenado con campo magnético y eléctrico, ambos perpendiculares al plano

de las capas de grafeno. Las soluciones son expresadas en términos de funciones de Ritus. Se incluye una sección de aplicaciones donde se traza el rumbo a seguir dentro del proyecto, utilizando el propagador calculado para determinar la conductividad eléctrica con la ayuda del operador de polarización.

- Finalmente, se presentan las conclusiones de este trabajo.

La aportación principal de este trabajo de tesis es la obtención de una expresión analítica exacta para el propagador fermiónico de los portadores de carga en el grafeno que, como se muestra en el desarrollo del trabajo, se puede extender al caso de una multicapa mediante el uso de la SUSY-QM. Como una parte novedosa del trabajo, para la obtención del propagador se trabajó en el espacio Euclidiano, en donde el campo eléctrico presenta una característica confinante. Asimismo, se hizo uso del formalismo de las funciones de Ritus, lo que permite obtener una expresión del propagador en términos de los espinores de la partícula libre y una matriz que contiene toda la dinámica del problema.

Capítulo 1

Estructura Cristalina del Grafeno

En este capítulo se calcula el Hamiltoniano efectivo que describe la dinámica de los portadores de carga de la multicapa de grafeno.

En la primera sección se estudia el Hamiltoniano de la monocapa, realizando una aproximación a primeros vecinos, con lo cual se obtiene el Hamiltoniano efectivo que la describe, que es el Hamiltoniano de Dirac sin masa en $(2+1)D$, en donde para cada una de las subredes triangulares que forman al grafeno se utilizan cada una de las representaciones irreducibles de las matrices de Dirac. En la segunda sección se agrega otra monocapa y se forma la bicapa; con la aproximación a primeros vecinos es posible calcular el Hamiltoniano efectivo en este caso, que es parecido al de la monocapa, pero en donde el operador de momento aparece a una potencia 2, que coincide con el número de capas. En la tercera sección se repite el proceso de agregar J capas, mencionando los

tipos de apilamiento en los que éstas se pueden agregar: ABA ó ABC. En particular en este trabajo se usa el apilamiento ABC. El Hamiltoniano efectivo en la aproximación de primeros vecinos que se obtiene para el caso de las J capas, tiene la misma estructura del Hamiltoniano efectivo de la monocapa, pero con el operador de momento elevado a la potencia J , igual al número de capas que constituyen a la multicapa.

El Hamiltoniano efectivo obtenido es útil para estudiar los efectos de la interacción de multicapas de grafeno con campos electromagnéticos externos.

1.1. Monocapa

El grafeno es un material formado por átomos de carbono dispuestos en una estructura hexagonal. Dicha estructura la podemos separar en dos subredes triangulares A y B, esto cuando se toma como referencia a un átomo de la red hexagonal y se une con otros tres formando un triángulo equilátero. Por lo anterior existe 120° entre cada átomo unido al átomo de referencia denominado A, mientras que a los tres átomos unidos a A se les agrupa en la red B [8]. Los vectores de red son (ver Figura 1.1):

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \left(3\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y} \right), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \left(3\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y} \right), \quad (1.1)$$

con parámetro de red $a = 0.142$ nm.

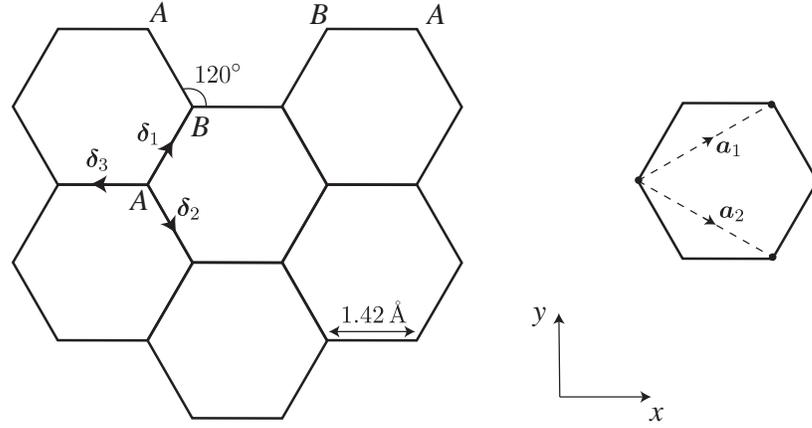


Figura 1.1: Red cristalina del grafeno en forma de panal, formada por dos subredes triangulares.

Tomada de [8].

Los vectores en el espacio recíproco cumplen la condición, $\vec{a}_n \cdot \vec{b}_m = 2\pi\delta_{nm}$, por lo que se definen

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}). \quad (1.2)$$

Estos vectores definen la primera zona de Brillouin que vuelve a ser de forma hexagonal, solo que con una rotación de $\pi/2$ con respecto a las red hexagonal del espacio real. En las esquinas de la red recíproca se encuentran los denominados puntos de Dirac que tienen coordenadas,

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{3a} \left(\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y} \right), \quad \vec{K}' = \frac{2\pi}{3a} \left(\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y} \right). \quad (1.3)$$

Los vectores en el espacio real de los primeros vecinos son

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2} (\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}), \quad \vec{\delta}_3 = -a\hat{x}. \quad (1.4)$$

La función de onda de un portador de carga en el sitio j se describe como la superposición de las funciones de onda pertenecientes a cada subred triangular,

$$\Psi_{\vec{k}}^{(j)}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_l} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} \left[a_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3} \varphi_A(\vec{r}) + b_k \varphi_B(\vec{r}) \right]. \quad (1.5)$$

donde a_k y b_k son funciones complejas dependientes del momentum y $\Psi_{\vec{k}}^{(j)}$ es una función de Bloch y puede describir cualquier punto en la red por una combinación entera de los vectores de la red, delimitando, de este modo, una celda generadora denominada red de Bravais hexagonal. $\varphi^{(j)}(\vec{r} + \vec{R}_l - \vec{\delta}_j)$ es la función de onda de un átomo centrado en $\vec{R}_l - \vec{\delta}_j$, el vector $\vec{\delta}_j$ es el que conecta los lados de \vec{R}_l en la red de Bravais con el lado del j -ésimo átomo dentro de la celda unitaria.

Fijando la atención en un punto arbitrario en la red A (ver Figura 1.1), los términos de salto son solo a sus tres primeros vecinos de la red B (B_1, B_2, B_3), los cuales tienen la misma amplitud de salto.

El objetivo es encontrar dinámica de los portadores de carga, descrito en este esquema, por la ecuación de Schrödinger,

$$\hat{H} |\Psi_k\rangle = \epsilon(\vec{k}) |\Psi_k\rangle. \quad (1.6)$$

Solo se considerarán los saltos a primeros vecinos, que corresponden a átomos de la otra red. La amplitud de salto a los primeros vecinos cercanos es del orden de $t \sim 3$ eV que es 10 veces mayor

que el salto a los siguientes vecinos, lo cual permite despreciar dichos términos en una primera aproximación, dicha aproximación es válida cuando la energía de los portadores de carga es baja en comparación a la amplitud a los primeros vecinos.

Para resolver la ecuación (1.6) se utilizará la ecuación secular, $\det[\mathcal{H}_k - \epsilon_k^\lambda \mathcal{S}_k] = 0$, donde \mathcal{H} es la representación matricial del Hamiltoniano y \mathcal{S} es la matriz de traslape,

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \langle \varphi_A^* | \hat{H} | \varphi_A \rangle & \langle \varphi_A^* | \hat{H} | \varphi_B \rangle \\ \langle \varphi_B^* | \hat{H} | \varphi_A \rangle & \langle \varphi_B^* | \hat{H} | \varphi_B \rangle \end{pmatrix}, \quad \mathcal{S} = \begin{pmatrix} \langle \varphi_A^* | \varphi_A \rangle & \langle \varphi_A^* | \varphi_B \rangle \\ \langle \varphi_B^* | \varphi_A \rangle & \langle \varphi_B^* | \varphi_B \rangle \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

Si despreciamos la contribución de la función de onda de sitios vecinos, $\langle \varphi_A^* | \varphi_B \rangle = 0$ al igual que $\langle \varphi_B^* | \varphi_A \rangle = 0$, entonces $\mathcal{S} = \mathbb{1}$. Si las dos redes son equivalentes, $\langle \varphi_A^* | \hat{H} | \varphi_A \rangle = \langle \varphi_B^* | \hat{H} | \varphi_B \rangle$, entonces los términos relevantes son los términos no diagonales $\mathcal{H}_k^{AB} \equiv \langle \varphi_A^* | \hat{H} | \varphi_B \rangle = N t_k^{AB}$ donde t_k^{AB} describe la amplitud de probabilidad de salto entre vecinos y N es una constante de normalización,

$$t_k^{AB} \equiv \sum_{\vec{R}_l} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} \int d^2r \varphi_{(A)}^*(\vec{r} - \vec{R}_k) \hat{H} \varphi_{(B)}(\vec{r} + \vec{\delta}_{AB} - \vec{R}_m).$$

La manera de obtener los elementos de matriz de \mathcal{H} [12, 13] es multiplicando la Ec. (1.6) por $\langle \varphi_A(r - \delta_3) |$, resultando

$$\epsilon_k^A a_k - t b_k f(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot R_l} a_k e^{i\vec{k} \cdot \delta_3}, \quad (1.8)$$

con

$$f(\vec{k}) \equiv (e^{i\vec{k} \cdot \delta_1} + e^{i\vec{k} \cdot \delta_2} + e^{i\vec{k} \cdot \delta_3}). \quad (1.9)$$

Ahora multiplicando (1.6) por $\langle \varphi_B(r) |$

$$\epsilon_k^B b_k - t a_k f^*(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_1} b_k. \quad (1.10)$$

Se utilizará la base

$$\begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \sum_{\vec{R}_l} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} \begin{pmatrix} a_{\vec{R}_l}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1/2} \\ b_{\vec{R}_l}^\dagger e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1/2} \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

donde $b_{\vec{R}_l}^\dagger$ crea un electrón en B en la celda unitaria \vec{R}_l . En esta base la matriz \mathcal{H} de la Ec. (1.7) se reduce,

$$\begin{pmatrix} 0 & -t f(\vec{k}) \\ -t f^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \epsilon(\vec{k}) \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}. \quad (1.12)$$

Los valores propios son

$$\epsilon(\vec{k}) = \pm t |f(\vec{k})|. \quad (1.13)$$

Sustituyendo los valores de la Ec. (1.4) en la (1.9) resulta

$$f(\vec{k}) = e^{ik_x a} \left[1 + e^{i\frac{3}{2}k_x a} \left(2 \cos \frac{\sqrt{3}}{2} k_y a \right) \right], \quad (1.14)$$

por lo que los valores propios quedan

$$\epsilon(\vec{k}) = \pm t \left(1 + 4 \cos \frac{3}{2} k_x a \cos \frac{\sqrt{3}}{2} k_y a + 4 \cos^2 \frac{\sqrt{3}}{2} k_y a \right)^{1/2}. \quad (1.15)$$

A continuación se calculará el Hamiltoniano en una aproximación cerca de los puntos de Dirac, por lo que es conveniente definir

$$\vec{q} \equiv \vec{k} - \vec{K}.$$

Se desarrolla la expresión (1.14) evaluada en $\vec{k} = \vec{q} + \vec{K}$ cerca de $\vec{q} = 0$,

$$f(\vec{q} + \vec{K}) = e^{i(q_x + k_x)a} \left[1 + e^{i\frac{3}{2}(q_x + k_x)a} \left(2 \cos \frac{\sqrt{3}}{2}(q_y + k_y)a \right) \right] \quad (1.16)$$

$$\approx f(\vec{q} = 0) + \nabla f'(\vec{q} = 0) \cdot \vec{q}. \quad (1.17)$$

Cuando se realiza la evaluación en $\vec{q} = 0$, el primer término del desarrollo se anula, mientras que el segundo queda

$$f(\vec{k} = \vec{K}) \approx -te^{-iK_x a} \frac{3a}{2}(iq_x + q_y). \quad (1.18)$$

De manera similar para el punto \vec{K}'

$$f(\vec{k} = \vec{K}') \approx -te^{-iK_x a} \frac{3a}{2}(iq_x - q_y). \quad (1.19)$$

Por lo que el Hamiltoniano efectivo H_D se obtiene al sustituir este último resultado en \mathcal{H} , descrito por la Ec. (1.7):

$$H_D = v \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

con

$$v \equiv \frac{3ta}{2\hbar}.$$

El Hamiltoniano de los portadores de carga puede escribirse mediante las matrices de Pauli σ^x y σ^y , de la forma

$$H_D = \pm v(p_x \sigma^x \pm p_y \sigma^y) \tag{1.21}$$

$$= \pm v \vec{p} \cdot \vec{\sigma}, \tag{1.22}$$

en donde de manera simplificada se está escribiendo el Hamiltoniano efectivo de cada una de las subredes A y B, siendo el signo + el correspondiente a la subred A y el signo – a la subred B.

Las matrices de Pauli están relacionadas con un grado de libertad asociado al momento angular intrínseco (espín), que en el caso de los portadores de carga en el grafeno se denomina pseudoespín. Al introducir interacciones con un campo magnético externo se presenta un acoplamiento de éste con el pseudoespín. En el apéndice A, se muestra cómo surge dicho acoplamiento en esta aproximación a primeros vecinos [14].

En lo sucesivo y a lo largo de la discusión de este trabajo se referirá al pseudoespín como espín.

La relación de dispersión lineal cerca de los puntos de Dirac (ver Fig. 1.2a), hace que el Hamiltoniano efectivo calculado con las aproximaciones antes mencionadas resulte ser la ecuación de Dirac para masa cero con velocidad efectiva v .

Los conos formados en la Fig. 1.2a muestran que no existe brecha entre la banda de conducción

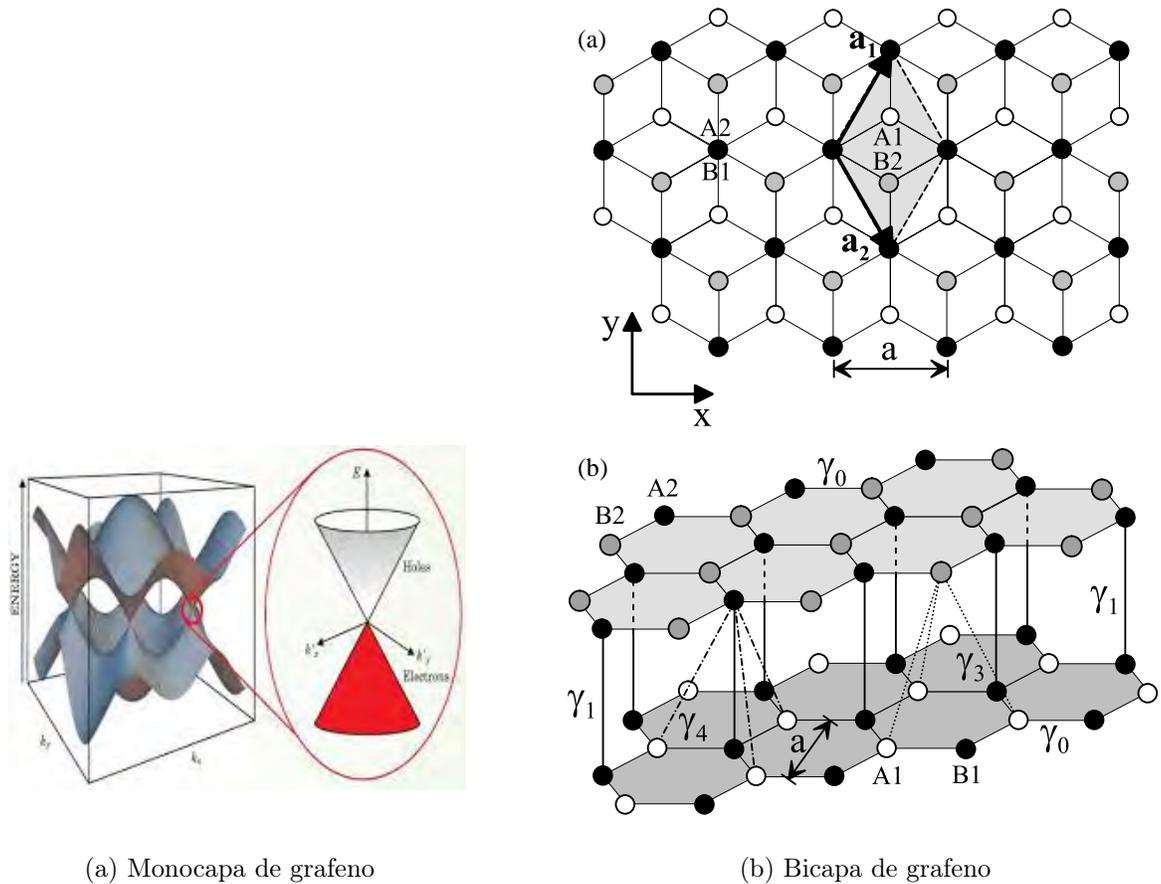


Figura 1.2: a) Estructura de Bandas de la monocapa de grafeno. Tomada de [8]. b - a) Vista planar de la bicapa de grafeno, se muestra la celda unitaria en forma de rombo. b - b) Vista lateral. Los átomos A_1 y B_1 de la capa inferior se muestran en blanco y negro, A_2 y B_2 de la capa superior son negros y grises, respectivamente. Tomada de [15].

y la banda de valencia; este comportamiento no permite que el grafeno tenga propiedades de semiconductor importante a nivel tecnológico.

Es importante reconocer que esto es el comienzo de un modelo muy sencillo. Es posible aplicar el mismo razonamiento para calcular el Hamiltoniano efectivo de la multicapa de grafeno al agregar capas.

1.2. Bicapa

Consideraremos una bicapa de grafeno consistente en dos monocapas 1, 2, acopladas con cuatro átomos en la celda unitaria $A1, B1$, de la capa inferior y $A2, B2$ de la superior. A los sitios donde se alinean los átomos $B1$ con $A2$, se les llama sitios tipo dímero [15]; en este caso las órbitas electrónicas se encuentran fuertemente acopladas. A los átomos $A1$ y $B2$ que no están alineados se les llaman sitios tipo no-dímero. El Hamiltoniano para la bicapa, en el modelo de tight-binding y usando la notación de Slonczewski-Weiss-McClure (SWM) [16], es:

$$\mathcal{H}_2 = \begin{pmatrix} \epsilon_{A1} & -\gamma_0 f(k) & \gamma_4 f(k) & -\gamma_3 f^*(k) \\ -\gamma_0 f^*(k) & \epsilon_{B1} & \gamma_1 & \gamma_4 f(k) \\ \gamma_4 f^*(k) & \gamma_1 & \epsilon_{A2} & -\gamma_0 f(k) \\ -\gamma_3 f(k) & \gamma_4 f^*(k) & -\gamma_0 f^*(k) & \epsilon_{B2} \end{pmatrix}, \quad (1.23)$$

donde $f(k)$ es la fase de la interacción entre vecinos cercanos, ϵ_{A1} , ϵ_{B1} , ϵ_{A2} y ϵ_{B2} describen la energía en los cuatro sitios de los átomos de la celda unitaria, en el caso más general no son

iguales. Los términos γ_i con $i = 0, 1, 3, 4$ son los términos de interacción entre átomos de una misma capa y con la otra capa:

$$\gamma_0 = -\langle \Psi_{(k,A1)} | \mathcal{H} | \Psi_{(k,B1)} \rangle = \langle \Psi_{(k,A2)} | \mathcal{H} | \Psi_{(k,B2)} \rangle, \quad (1.24)$$

$$\gamma_1 = \langle \Psi_{(k,A2)} | \mathcal{H} | \Psi_{(k,B1)} \rangle, \quad (1.25)$$

$$\gamma_3 = -\langle \Psi_{(k,A1)} | \mathcal{H} | \Psi_{(k,B2)} \rangle, \quad (1.26)$$

$$\gamma_4 = \langle \Psi_{(k,A1)} | \mathcal{H} | \Psi_{(k,A2)} \rangle = \langle \Psi_{(k,B1)} | \mathcal{H} | \Psi_{(k,B2)} \rangle. \quad (1.27)$$

El parámetro γ_1 describe el acoplamiento entre sitios tipo dímero ($B1$ y $A2$), γ_3 corresponde a la interacción entre los sitios no-dímero ($B2$ y $A1$) y γ_4 la interacción entre sitios tipo dímero con sitios no-dímero.

\mathcal{H}_2 se puede expresar con bloques de matrices de 2×2 , identificando a los bloques superior izquierdo e inferior derecho como el Hamiltoniano de la monocapa, los otros dos bloques describen el acoplamiento entre capas.

En este caso los estados de Bloch $\Psi^{(j)}$, con $j = (A1, B1, A2, B2)$, son un espinor de la forma $\Psi^\dagger = (\psi_{A1}^*, \psi_{B1}^*, \psi_{A2}^*, \psi_{B2}^*)$. Introduzcamos, al igual que en el caso de la monocapa, la matriz de

traslape cuyos elementos son $s_{jj'} = \langle \Psi_j | \Psi_{j'} \rangle$:

$$\mathcal{S}_2 = \begin{pmatrix} 1 & s_0 f(k) & 0 & 0 \\ s_0 f^*(k) & 1 & s_1 & 0 \\ 0 & s_1 & 1 & s_0 f(k) \\ 0 & 0 & s_0 f^*(k) & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.28)$$

Los términos más significativos son: $s_0 = s_{A1,B1} = s_{A2,B2}$ y $s_1 = s_{A2,B1}$. s_0 es el traslape entre primeros vecinos de una misma capa, mientras que s_1 es el traslape entre sitios tipo dímero. Los parámetros de traslape análogos a γ_3 y γ_4 se vuelven despreciables y pueden considerarse como ortogonales. Para bajas energías ($E \leq \gamma_1$) los parámetros s_0 y s_1 son despreciables, por lo que la matriz de traslape puede aproximarse como la identidad.

Algunos valores de los parámetros obtenidos por espectroscopía infrarroja [15], son: $\gamma_0 = 3.16$ eV, $\gamma_1 = 0.381$ eV $\gamma_3 = 0.38$ eV $\gamma_4 = 0.14$ eV $\epsilon_{B1} = \epsilon_{A2} = 0.022$ eV y $\epsilon_{A1} = \epsilon_{B2} = 0$.

Los valores muestran cómo el término que más contribuye es el γ_1 , por lo cual, la aproximación a continuación considerada es perfectamente válida para obtener el Hamiltoniano efectivo cerca de los puntos K_ξ (donde $\xi = \pm$) del espacio recíproco.

Entonces cerca de K_ξ , usando tight-binding como en el caso de la monocapa,

$$f(k) \approx \frac{\sqrt{3}a(\xi p_x - i p_y)}{2\hbar}.$$

Realizando los siguientes cambios de variable

$$\pi = \xi p_x + i p_y, \quad v = \frac{\sqrt{3}a\gamma_0}{2\hbar}, \quad (1.29)$$

siendo v velocidad de Fermi en cada capa, e introduciendo las velocidades efectivas

$$v_3 = \frac{\sqrt{3}a\gamma_3}{2\hbar}, \quad v_4 = \frac{\sqrt{3}a\gamma_4}{2\hbar}, \quad (1.30)$$

el Hamiltoniano de la bicapa descrito por la Ec. (1.23) se puede escribir como:

$$\mathcal{H}_2 = \begin{pmatrix} \epsilon_{A1} & v\pi^\dagger & -v_4\pi^\dagger & v_3\pi \\ v\pi & \epsilon_{B1} & \gamma_1 & -v_4\pi \\ -v_4\pi & \gamma_1 & \epsilon_{A2} & v\pi^\dagger \\ v_3\pi & -v_4\pi & v\pi & \epsilon_{B2} \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

Definiendo los bloques de 2×2 antes mencionados como

$$h_\theta = \begin{pmatrix} \epsilon_{A1} & v_3\pi \\ v_3\pi^\dagger & \epsilon_{B2} \end{pmatrix}, \quad h_\chi = \begin{pmatrix} \epsilon_{A2} & \gamma_1 \\ \gamma_1 & \epsilon_{B1} \end{pmatrix}, \quad (1.32)$$

$$u = \begin{pmatrix} -v_4\pi^\dagger & v\pi^\dagger \\ v\pi & -v_4\pi \end{pmatrix}, \quad u^\dagger = \begin{pmatrix} -v_4\pi & v\pi^\dagger \\ v\pi & -v_4\pi^\dagger \end{pmatrix}, \quad (1.33)$$

se observa que \mathcal{H}_2 se puede reescribir de forma compacta en la base $(\Psi_{A1}, \Psi_{B2}, \Psi_{A2}, \Psi_{B1})^T$:

$$\mathcal{H}_2 = \begin{pmatrix} h_\theta & u \\ u^\dagger & h_\chi \end{pmatrix}. \quad (1.34)$$

De igual forma el espinor se puede separar en dos biespinores:

$$\theta = (\Psi_{A1}, \Psi_{B2})^T; \quad \chi = (\Psi_{A2}, \Psi_{B1})^T, \quad (1.35)$$

por lo que finalmente la ecuación de Schrödinger para la bicapa de grafeno es

$$\begin{pmatrix} h_\theta & u \\ u^\dagger & h_\chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \theta \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (1.36)$$

A continuación se buscará la expresión del Hamiltoniano para bajas energías ($|E| \ll \langle h_\chi \rangle$). Tomando la segunda componente de la Ec. (1.36),

$$u^\dagger \theta + h_\chi \chi = E \chi, \quad (1.37)$$

se despeja χ para desacoplar

$$\chi = (E - h_\chi)^{-1} u^\dagger \theta. \quad (1.38)$$

Sustituyendo en la primera componente de la Ec. (1.36), se tiene

$$[h_\theta + u(E - h_\chi)^{-1} u^\dagger] \theta = E \theta. \quad (1.39)$$

Observando que $(1 - E h_\chi^{-1})^{-1} \approx 1 + E h_\chi^{-1}$, entonces la Ec. (1.39) se puede aproximar como,

$$[h_\theta - u h_\chi^{-1} u^\dagger] \theta \approx E \theta, \quad (1.40)$$

donde

$$S = 1 + uh_{\chi}^{-2}u^{\dagger}. \quad (1.41)$$

Se propone una transformación de la forma

$$\phi = S^{1/2}\theta, \quad (1.42)$$

de modo que su transformación inversa es

$$\theta = S^{-1/2}\phi. \quad (1.43)$$

Aplicando la transformación unitaria (1.42) en la Ec. (1.38) en la aproximación para pequeñas energías

$$\chi \approx -h_{\chi}^{-1}u^{\dagger}\theta. \quad (1.44)$$

Entonces del Hamiltoniano total se obtiene la siguiente ecuación efectiva,

$$\mathcal{H}_{efec}\phi \approx E\phi \quad (1.45)$$

con

$$\mathcal{H}_{efec} = S^{-1/2} [h_{\theta} - uh_{\chi}^{-1}u^{\dagger}] S^{-1/2}. \quad (1.46)$$

Utilizando la forma explícita de la matrices descritas en la Ecs. (1.32) y (1.33) en la Ec. (1.46) y teniendo en cuenta la aproximación $\gamma_0, \gamma_1 \gg \mathcal{E}$ (con \mathcal{E} cualquier otro parámetro relevante en el

problema como E, γ_3, γ_4 , etc), el Hamiltoniano efectivo, en términos de matrices de 2×2 , queda de la forma,

$$\mathcal{H}_2^{efec} = \hat{h}_0 + \hat{h}_w + \hat{h}_4 + \hat{h}_\delta + \hat{h}_U + \hat{h}_{AB}, \quad (1.47)$$

con

$$\hat{h}_0 = -\frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^2 \\ \pi^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.48)$$

$$\hat{h}_w = v_3 \begin{pmatrix} 0 & \pi \\ \pi^\dagger & 0 \end{pmatrix} - \frac{v_3 a}{4\sqrt{3}\hbar} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^2 \\ \pi^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.49)$$

$$\hat{h}_4 = \frac{2vv_4}{\gamma_1} \begin{pmatrix} \pi^\dagger \pi & 0 \\ 0 & \pi \pi^\dagger \end{pmatrix}, \quad (1.50)$$

$$\hat{h}_\delta = \begin{pmatrix} \pi^\dagger \pi & 0 \\ 0 & \pi \pi^\dagger \end{pmatrix}, \quad (1.51)$$

$$\hat{h}_U = -\frac{U}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{2v^2}{\gamma_1^2} \begin{pmatrix} \pi^\dagger \pi & 0 \\ 0 & -\pi \pi^\dagger \end{pmatrix} \right], \quad (1.52)$$

$$\hat{h}_{AB} = \frac{\delta_{AB}}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.53)$$

con

$$U = \frac{1}{2} [(\epsilon_{A1} + \epsilon_{B1}) - (\epsilon_{A2} + \epsilon_{B2})], \quad (1.54)$$

$$\delta_{AB} = \frac{1}{2} [(\epsilon_{A1} + \epsilon_{A2}) - (\epsilon_{B1} + \epsilon_{B2})], \quad (1.55)$$

siendo \hat{h}_0 el término dominante en el régimen donde las energías son menores que las energías de salto ($|E| \ll \gamma_1$), el cual muestra una estructura quirral para los portadores de carga. Los otros términos se pueden considerar como perturbaciones de \hat{h}_0 . Los términos \hat{h}_U y \hat{h}_{AB} producen la brecha entre la banda de valencia y de conducción [15]. El Hamiltoniano efectivo es

$$\mathcal{H}_2^{efec} = -\frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^2 \\ \pi^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.56)$$

y su cuadrado tiene una estructura supersimétrica de Dirac, por lo que la metodología que posteriormente se desarrollará aplica en este caso también [17].

El siguiente paso será calcular el Hamiltoniano efectivo de la multicapa de grafeno agregando monocapas para así, posteriormente introducir diferentes perfiles de campo magnético y eléctrico a través de mecanismos desarrollados a continuación, que permiten abrir la brecha entre bandas.

1.3. Multicapa

Cuando al modelo se le agrega una tercera capa existen dos formas en las cuales ésta tiende a orientarse: cuando se encuentra rotada 60° con respecto a la bicapa o -60° respecto a la bicapa.

Al ir agregando cada vez más capas se encuentra que este par de casos se repiten a lo largo de una línea vertical con respecto al plano de las capas. A este proceso de ir agregando capas se le denomina apilamiento.

Al apilamiento que se obtiene cuando la tercera capa esté rotada 60° con respecto a la bicapa se le denomina apilamiento Bernal, que es una secuencia llamada ABABA..., y cuando está rotada -60° se obtiene el apilamiento Romboédrico ABCABC... (ver Fig. 1.3).

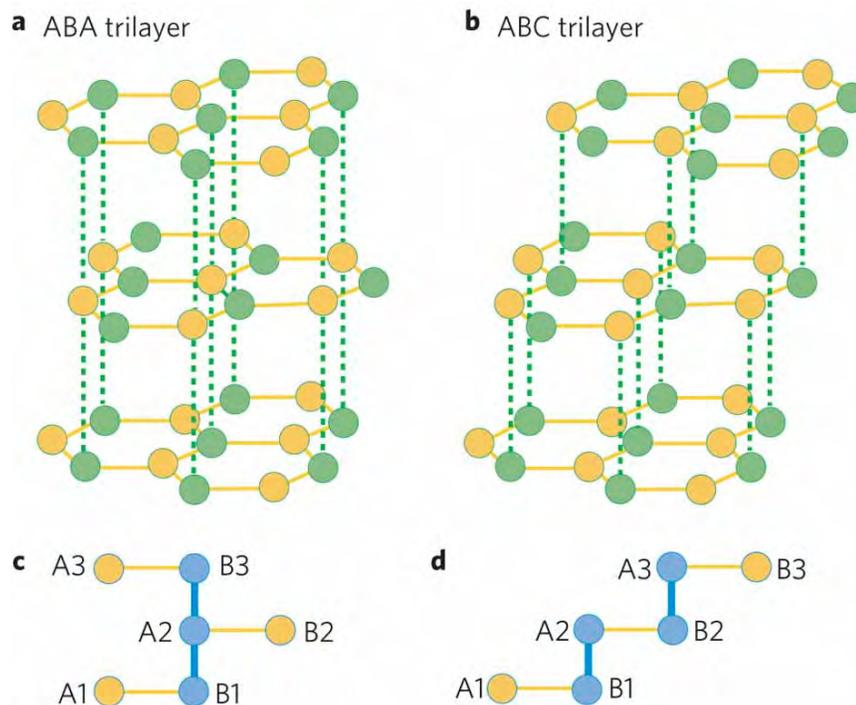


Figura 1.3: Tipos de Apilamiento Bernal ABA y Romboédrico ABC para una tricapa. Imagen tomada de [19].

La notación es muy clara para el apilamiento Bernal, las monocapas se apilan de tal manera que sobre una línea perpendicular a los planos de las capas se encuentran sitios A y B de manera alternada. En el apilamiento Romboédrico la secuencia de los sitios a lo largo de la línea vertical a los planos es ABCABCA..., donde C indica el centro del hexágono de la tercera capa. Recientemente los experimentos realizados con técnicas como adsorción óptica, espectroscopía Raman y transmisión en microscopio electrónico [18] muestran resultados que indican que las capas tienden a apilarse preferentemente en la forma Bernal, esto principalmente en muestras obtenidas por exfoliación, aunque a menudo se encuentran, en parte, en la forma Romboédrica. En general las estructuras de las multicapas de grafeno son una combinación de los dos apilamientos, Bernal-Romboédrica.

En general el Hamiltoniano de una multicapa de J capas tiene una estructura matricial de $2J \times 2J$, cuyos elementos de matriz tienen la forma $\mathcal{H}_{\{k,m\}} = \langle \Psi_k | \mathcal{H} | \Psi_m \rangle$, donde k y m etiquetan cada sitio: A1, B1, A2, B2, ..., AJ, BJ. Observemos que si se considera un régimen de bajas energías, a comparación de las energías de salto, solo existe interacción entre átomos de la misma capa y con los siguientes vecinos más cercanos. Introduzcamos una nueva notación, Ψ_k^j , que indica el sitio por el índice k (A,B) y la capa con el índice j ($j = 1, 2, \dots, J$). Con esta nueva notación los términos a considerar son: $\gamma_0 = \langle \Psi_k^j | \mathcal{H} | \Psi_m^j \rangle$, $\gamma_1 = \langle \Psi_k^j | \mathcal{H} | \Psi_m^{j\pm 1} \rangle$ y $\gamma = \langle \Psi_k^j | \mathcal{H} | \Psi_k^{j\pm 1} \rangle$. Nótese que es de vital importancia definir la base y el tipo de apilamiento utilizados en este sistema para realizar cálculos de la manera más sencilla.

Apilamiento Bernal

La celda unitaria se conforma de sitios A_j y B_j , donde $j = 1, 2, \dots, J$. indica el número de capa.

Por conveniencia se divide en dos grupos: Grupo I: B_1, A_2, B_3, \dots y Grupo II: A_1, B_2, A_3, \dots

Los átomos del grupo I se encuentran a lo largo de la vertical al plano, mientras los del grupo II se encuentran por debajo y por arriba del centro de los hexágonos de la capa vecina. Como se sabe de mecánica cuántica, la base tomada será fundamental para obtener la matriz Hamiltoniana de la multicapa, para este caso se escogerá la base de la siguiente manera: $\{|\Psi_A^1\rangle, |\Psi_B^1\rangle, |\Psi_A^2\rangle, |\Psi_B^2\rangle; \dots; |\Psi_A^J\rangle, |\Psi_B^J\rangle\}$; por lo que el Hamiltoniano para la multicapa cerca del punto de Dirac, K, [20] en la notación SWM es:

$$\mathcal{H}_{efec}^J = \begin{pmatrix} H_0 & V & & & \\ V^\dagger & H_0 & V^\dagger & & \\ & V & H_0 & V & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.57)$$

con H_0 el hamiltoniano de una monocapa

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & \gamma\pi_- \\ \gamma\pi_+ & 0 \end{pmatrix}; \quad V = \begin{pmatrix} 0 & \gamma'\pi_+ \\ \gamma_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.58)$$

y con $\pi_\pm \equiv \pi_x \pm i\pi_y$. El Hamiltoniano efectivo cerca del punto K' es obtenido intercambiando π_+ por π_- y γ_1 con $-\gamma_1$ [20].

La base puede ser ordenada en términos de subconjuntos de vectores, para así reducir las

manera:

$$\left\{ \underbrace{(\Psi_A^1, \Psi_B^J)}_{\theta}, \underbrace{(\Psi_B^1, \Psi_A^2), (\Psi_B^2, \Psi_A^3), \dots, (\Psi_B^{J-1}, \Psi_A^J)}_x \right\}, \quad (1.64)$$

la cual se forma con pares de átomos enlazados como muestra la Fig. (1.4).

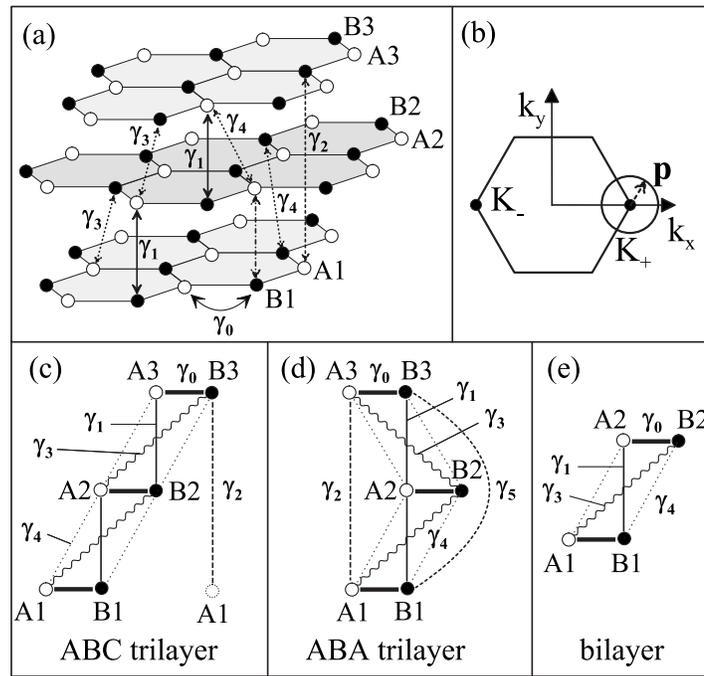


Figura 1.4: a) Tricapa de grafeno apilada ABC, se observan de blanco los átomos de la subred A y de negro los de la subred B. b) Zona de Brillouin hexagonal en los dos puntos K_{\pm} . c) Celda unitaria de la tricapa en ABC. d) Celda unitaria de la tricapa en ABA. e) Bicapa de grafeno. Tomada de [19].

Los pares enlazados son: Ψ_B^j, Ψ_A^{j+1} con $j = 1, 2, \dots, J - 1$. Los dos átomos de las capas externas (Ψ_A^1, Ψ_B^J) no están enlazados. El Hamiltoniano, usando la notación de SWM, es de la forma:

$$\mathcal{H}^J = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \quad (1.65)$$

donde H_{11} es una matriz de 2×2 de las componentes no enlazadas o no-dímero, H_{22} es una matriz de $2(J - 1) \times 2(J - 1)$ de los pares dímero y H_{21} y H_{12} , de dimensión $2 \times 2(J - 1)$ y $2(J - 1) \times 2$ respectivamente, contienen términos de interacción entre componentes enlazadas con componentes no enlazadas (dímero con no-dímero). Es importante hacer notar que cada elemento de la Ec. (1.65) tiene una relación con las matrices $h_\chi, h_\theta, u, u^\dagger$ de la Ec. (1.34) de la siguiente manera:

$$h_\chi \rightarrow H_{22}, \quad h_\theta \rightarrow H_{11}, \quad u \rightarrow H_{12}, \quad u^\dagger \rightarrow H_{21}. \quad (1.66)$$

Para obtener un Hamiltoniano efectivo que mantiene la estructura quirral con π^J , se realiza la transformación de la Ec. (1.46).

El término más relevante en el Hamiltoniano efectivo es,

$$\mathcal{H}_{efec}^J = \frac{1}{\gamma_1^{J-1}} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^J \\ \pi^J & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.67)$$

Es importante mencionar que los pares no enlazados son los que más contribuyen al Hamiltoniano debido a que las funciones de onda, al no estar enlazadas una con otra, tienen una amplitud mayor.

Para un ejemplo concreto veamos el caso de la tricapa de grafeno [19]:

El Hamiltoniano de la tricapa es una matriz de 6×6 , el cual tiene un espinor en la base de 6 componentes. Expresando dicha base en dos subespinores de la siguiente forma: $\theta = (\Psi_A^1, \Psi_B^3)^T$, $\chi = (\Psi_B^1, \Psi_A^2, \Psi_B^2, \Psi_A^3)^T$, los cuales son parecidos a los espinores en la Ec. (1.35), se puede expresar el Hamiltoniano en una forma análoga a la Ec. (1.34), donde h_θ es una matriz de 2×2 , h_χ es una matriz de 4×4 ; u y u^\dagger son matrices de 4×2 y de 2×4 respectivamente. Utilizando la aproximación a bajas energías de la Ec. (1.46), el Hamiltoniano efectivo es,

$$\mathcal{H}_{efec}^3 = \hat{h}_0^3 + \hat{h}_{3w} + \hat{h}_{3c} + \hat{h}_{\Delta 1} + \hat{h}_{\Delta 2}, \quad (1.68)$$

con

$$\hat{h}_0^3 = \frac{v^3}{\gamma_1^2} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^3 \\ \pi^3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.69)$$

$$\hat{h}_{3w} = \left(-\frac{2vv_3p^2}{\gamma_1} + \frac{\gamma_2}{2} \right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.70)$$

$$\hat{h}_{3c} = \frac{2vv_4p^2}{\gamma_1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.71)$$

$$\hat{h}_{\Delta 1} = \Delta_1 \left(1 - \frac{v^2p^2}{\gamma_1^2} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.72)$$

$$\hat{h}_{\Delta_2} = \Delta_2 \left(1 - \frac{3v^2 p^2}{\gamma_1^2} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.73)$$

donde las velocidades v, v_3, v_4 están definidas por las Ecs. (1.29) y (1.30); y

$$\Delta_1 = \frac{\epsilon_1 - \epsilon_3}{2}, \quad \Delta_2 = \frac{\epsilon_1 - 2\epsilon_2 + \epsilon_3}{6}. \quad (1.74)$$

Hasta ahora se ha encontrado la forma efectiva del Hamiltoniano de una multicapa de grafeno en su aproximación de vecinos cercanos y se ha obtenido que tiene una estructura parecida a la de una ecuación de Dirac con una potencia mayor del operador de momento. En el siguiente capítulo se buscará la manera de dar solución a este Hamiltoniano efectivo; el formalismo que se utiliza reduce el problema a uno que está en función de algo ya conocido, como lo es la monocapa de grafeno. El formalismo utilizado es general y puede servir para cualquier perfil de campo electromagnético externo en la dirección perpendicular al plano del grafeno. En particular, en este trabajo se introducirá un campo magnético y eléctrico, ambos en la dirección perpendicular a las capas de grafeno.

Capítulo 2

Multicapas de Grafeno con SUSY-QM

Este capítulo tiene como finalidad encontrar las soluciones al Hamiltoniano efectivo de la multicapa de grafeno utilizando el formalismo de la Supersimetría de la Mecánica Cuántica (SUSY-QM). Primero se plantean las bases teóricas de SUSY-QM, con los potenciales compañeros, para luego comprobar que el problema de la multicapa trabajado en el capítulo anterior puede ser resuelto con ayuda del formalismo SUSY-QM.

2.1. SUSY-QM

Se presentan los aspectos generales de la supersimetría de la mecánica cuántica (SUSY-QM) para posteriormente trabajar sobre el sistema de la multicapa de grafeno.

El álgebra involucrada en SUSY es una clase de álgebra de Lie formada de relaciones de

conmutación y anticonmutación. Cuando se establecen relaciones para un conjunto de operadores que cumpla ambas reglas se dice que se forma un superálgebra.

En mecánica cuántica a un Hamiltoniano \mathcal{H} y a un conjunto de N operadores autoadjuntos Q_i se le llama un sistema supersimétrico si cumple con las siguientes relaciones de anticonmutación

$$\{Q_i, Q_j\} = \mathcal{H}\delta_{ij} \quad i, j = 1, 2, \dots, N \quad [Q, \mathcal{H}] = 0. \quad (2.1)$$

Cuando el álgebra anterior se satisface nombramos a Q_i como las supercargas del sistema y \mathcal{H} es el Hamiltoniano supersimétrico. Un álgebra SUSY está caracterizada por el número de supercargas denotadas por N . El caso más simple es $N = 2$, el cual fue introducido por Witten en 1981. Este modelo describe grados de libertad cartesianos a los cuales se le agrega un grado de libertad extra debido al espín.

SUSY-QM involucra parejas de Hamiltonianos, llamados Hamiltonianos compañeros, los cuales están relacionados matemáticamente. A las energías potenciales que tiene cada Hamiltoniano se les llama potenciales compañeros.

La ecuación de Schrödinger que satisface uno de estos sistemas etiquetado con un índice 1 es:

$$H_1\psi^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi^{(1)}}{dx^2} + V_1(x)\psi^{(1)} = E_1\psi^{(1)}. \quad (2.2)$$

Dado el potencial $V_1(x)$ en principio se puede conocer el espectro de energías del sistema y la función de onda del estado base $\psi_0^{(1)}$. Sin pérdida de generalidad se puede escoger el nivel del estado base para H_1 como $E_0^{(1)} = 0$, por lo que la ecuación evaluada en el estado base permite

escribir al potencial en términos de la función de estado base:

$$V_1(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial_x^2 \psi_0^{(1)}}{\psi_0^{(0)}}. \quad (2.3)$$

Introduzcamos a las operadores

$$L = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \partial_x + W(x), \quad L^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \partial_x + W(x), \quad (2.4)$$

donde $W(x)$ es conocido como el superpotencial que tiene que satisfacer la ecuación de Riccati

$$V_1 = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \partial_x W(x), \quad (2.5)$$

por los que podemos escribir al Hamiltoniano como

$$H_1 = L^\dagger L. \quad (2.6)$$

Una solución de $W(x)$ en función de la función de estado base que satisface $H_1 \psi_0^{(1)} = 0$, es

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\partial_x \psi_0^{(1)}}{\psi_0^{(1)}}. \quad (2.7)$$

Para construir la teoría SUSY, se define un nuevo Hamiltoniano

$$H_2 = LL^\dagger, \quad (2.8)$$

donde H_2 tiene su propio potencial V_2 que satisface su propia ecuación de Schrödinger y de Riccati

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_2(x), \quad (2.9)$$

$$V_2 = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \partial_x W(x). \quad (2.10)$$

Los potenciales V_2 y V_1 son los potenciales compañeros del problema y la relación entre los Hamiltonianos, valores propios (espectros) y funciones propias es de la siguiente manera:

Aplicando por la izquierda L a la ecuación de valores propios del Hamiltoniano H_1

$$L(H_1\psi_n^{(1)}) = LL^\dagger L\psi_n^{(1)} = E_n^{(1)}L\psi_n^{(1)} = H_2(L\psi_n^{(1)}), \quad (2.11)$$

similar pero ahora aplicando por la izquierda L^\dagger al Hamiltoniano H_2

$$L^\dagger(H_2\psi_n^{(2)}) = L^\dagger LL^\dagger\psi_n^{(2)} = E_n^{(2)}L^\dagger\psi_n^{(2)} = H_1(L^\dagger\psi_n^{(2)}). \quad (2.12)$$

Se puede observar que para H_1 la función $L^\dagger\psi_n^{(2)}$ es propia, también para H_2 la función $L\psi_n^{(1)}$ es propia, por lo que del último análisis junto con la condición $E_0^{(1)} = 0$ se pueden identificar a L y L^\dagger con los operadores de ascenso y descenso que cumplen [22]

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= E_{n+1}^{(1)}, \\ \psi_n^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(1)}}}L\psi_{n+1}^{(1)}, \\ \psi_{n+1}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{E_n^{(2)}}}L^\dagger\psi_n^{(2)}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

De esta manera, conociendo las funciones propias y el espectro de H_1 se pueden saber las funciones propias y el espectro de H_2 con los operadores L y L^\dagger .

Se puede construir un Hamiltoniano SUSY con las supercargas definidas de la siguiente manera

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ L & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & L^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Por lo que

$$\{Q, Q^\dagger\} = \mathcal{H} = \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Si se logran encontrar operadores Q y Q^\dagger tales que Hamiltoniano de Dirac se puede escribir de la forma

$$\hat{H}_D = Q + Q^\dagger, \quad (2.16)$$

entonces el cuadrado del Hamiltoniano de Dirac es SUSY,

$$\mathcal{H} = \hat{H}_D^2 = (Q + Q^\dagger)^2 = Q^2 + \{Q, Q^\dagger\} + (Q^\dagger)^2, \quad (2.17)$$

donde $Q^2 = (Q^\dagger)^2 = 0$. Como \hat{H}_D y \hat{H}_D^2 tienen el mismo espectro, con el carácter SUSY de \hat{H}_D^2 se pueden encontrar las soluciones al Hamiltoniano de Dirac tan solo determinando la soluciones de H_1 o H_2 y con las relaciones descritas por las Ecs. (2.13) se puede obtener las soluciones de su Hamiltoniano compañero H_2 o H_1 .

Ya teniendo conocimiento de la capacidad teórica que tiene SUSY-QM es posible aplicar este formalismo a las multicapas de grafeno mediante los Hamiltonianos compañeros.

2.2. Multicapa con SUSY-QM

El Hamiltoniano efectivo de la multicapa de grafeno que se obtuvo en el capítulo 1, Ec. (1.67), se puede representar con una ecuación tipo Dirac en su forma reducible de $(2+1)D$ para cada una

de las subredes triangulares. En este sistema se introduce un campo magnético en dirección z con perfil arbitrario en la norma asimétrica de Landau, dada por $A_\mu = (0, 0, A(x), 0)$. En adelante, se trabajará con unidades naturales.

Para resolver dicho problema y así poder aprovechar la supersimetría de la mecánica cuántica mediante potenciales compañeros de este sistema, se introducen los siguientes operadores

$$L^\pm = \mp \frac{d}{dx} + W(x), \quad \text{con} \quad W(x) = p_2 + eA(x), \quad (2.18)$$

L^+ y L^- son operadores de ascenso y descenso

$$L^+ = \hat{\Pi}_x - i\hat{\Pi}_y, \quad L^- = -\hat{\Pi}_x - i\hat{\Pi}_y. \quad (2.19)$$

Con esto último se escribe el Hamiltoniano efectivo de la multicapa en cada una de sus representaciones, de la siguiente manera

$$\hat{H}_A^{efec} = v^{(J)} \begin{pmatrix} 0 & (L^+)^J \\ (L^-)^J & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{H}_B^{efec} = v^{(J)} \begin{pmatrix} 0 & (L^-)^J \\ (L^+)^J & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

con $v^{(J)}$ la velocidad de los portadores de carga, para caso de la monocapa, $J = 1$, $v \equiv 3ta/(2\hbar)$.

Se puede observar que los Hamiltonianos efectivos descritos en las Ecs. (2.20), junto con las

supercargas definidas en la Ec. (2.14), tienen una forma SUSY-QM, dada por

$$\mathcal{H}_A^{(J)} = \begin{pmatrix} (L^+)^J(L^-)^J & 0 \\ 0 & (L^-)^J(L^+)^J \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H}_B^{(J)} = \begin{pmatrix} (L^-)^J(L^+)^J & 0 \\ 0 & (L^+)^J(L^-)^J \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

$$\mathcal{H}_A^{(J)} = \begin{pmatrix} [\mathcal{H}_A^{(J)}]_{11} & 0 \\ 0 & [\mathcal{H}_A^{(J)}]_{22} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H}_B^{(J)} = \begin{pmatrix} [\mathcal{H}_B^{(J)}]_{11} & 0 \\ 0 & [\mathcal{H}_B^{(J)}]_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Es importante hacer notar que las componentes de los Hamiltonianos supersimétricos guardan una simetría tal que $[\mathcal{H}_A^{(J)}]_{11} = [\mathcal{H}_B^{(J)}]_{22}$ y $[\mathcal{H}_A^{(J)}]_{22} = [\mathcal{H}_B^{(J)}]_{11}$ por lo que simplemente se tendrá que resolver una de las componentes y con la ayuda del formalismo supersimétrico se obtendrá la otra componente que a su vez también resuelve el Hamiltoniano en la otra representación. El efecto de los operadores L^+ y L^- es

$$L^+ \varphi_{n-1}^\pm = \sqrt{\varepsilon_n^\mp} \varphi_n^\mp, \quad (2.23)$$

$$L^- \varphi_n^\mp = \sqrt{\varepsilon_n^\pm} \varphi_{n-1}^\pm, \quad (2.24)$$

con φ_n^\pm las funciones propias de cada una de las componentes del espinor, solución del Hamiltoniano efectivo de la monocapa [17] y ε_n^\pm son los valores propios correspondientes. $n \geq 0$.

Si J es par o impar, es de relevancia debido a que la acción de L^\pm hace que φ cambie de componente de φ^+ a φ^- . Por lo que aplicar $(L^+)^J$ un número de veces impar hace que φ cambie de φ^\pm a φ^\mp , mientras que si J es par φ regresa al signo que tenía anteriormente. Es por eso que se hará un análisis por casos, cuando J es par o impar, ya que tendrá repercusión en los valores propios.

Primero consideremos el **caso de J par**. Para comenzar se propone el espinor solución del Hamiltoniano descrito por la Ec. (2.21) tomando en cuenta el efecto de los operadores de ascenso y descenso, los cuales son aplicados J veces a cada componente del espinor, de ahí que cualquier espinor cuyas componentes difieran en J niveles entre sí, es solución:

$$\Psi_n^-(x) = \begin{pmatrix} \varphi_n^-(x) \\ \varphi_{n-J}^-(x) \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

donde $n > J$. Comprobemos que $\Psi_n^-(x)$ es realmente solución de $\mathcal{H}_A^{(J)}$:

$$\mathcal{H}_A^{(J)} \Psi_n^- = \begin{pmatrix} \sqrt{\varepsilon_n^- \varepsilon_{n-1}^+ \varepsilon_{n-2}^- \cdots \varepsilon_{n-J+1}^+} (L^+)^J \varphi_{n-J}^- \\ \sqrt{\varepsilon_{n-J+1}^+ \cdots \varepsilon_{n-2}^- \varepsilon_{n-1}^+ \varepsilon_n^-} (L^-)^J \varphi_n^+ \end{pmatrix} = E_{A,n}^{(J,-)} \Psi_n^-, \quad (2.26)$$

con $E_{A,n}^{(J,-)} = \varepsilon_n^- \varepsilon_{n-1}^+ \cdots \varepsilon_{n-J+1}^+$ sólo si $n > J$. Ahora se propone una transformación \mathcal{L}_J^+ para obtener el conjunto completo de soluciones de $\mathcal{H}_A^{(J)}$, dicha transformación debe tener el mismo efecto de los operadores L^+ , L^- , por lo que debe de cumplir con

$$\mathcal{L}_1^- \mathcal{L}_1^+ \Psi_n^-(x) = \Psi_n^-(x), \quad (2.27)$$

la propuesta es

$$\mathcal{L}_J^+ = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{n+1}^+}} L^+ & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{n-J+1}^+}} L^+ \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

aplicando la transformación a Ψ_n^- para obtener Ψ_n^+ , esto es

$$\mathcal{L}_J^+ \Psi_n^- = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{n+1}^+}} L^+ \varphi_n^- \\ \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{n-J+1}^+}} L^+ \varphi_{n-J}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_{n+1}^+ \\ \varphi_{n-J+1}^+ \end{pmatrix} = \Psi_n^+. \quad (2.29)$$

Y con \mathcal{L}_J^- una transformación propuesta de manera similar para que cumpla con la Ec. (2.27), se puede comprobar que regresamos a Ψ_n^-

$$\mathcal{L}_J^- \Psi_n^+ = \begin{pmatrix} \varphi_n^- \\ \varphi_{n-J}^- \end{pmatrix} = \Psi_n^-. \quad (2.30)$$

Ahora veamos cómo son los valores propios de Ψ_n^+

$$\mathcal{H}_A^{(J)} \Psi_n^+ = \varepsilon_{n+1}^+ \varepsilon_n^- \cdots \varepsilon_{n-J+3}^+ \varepsilon_{n-J+2}^- \begin{pmatrix} \varphi_{n+1}^+ \\ \varphi_{n-J+1}^+ \end{pmatrix} = E_{A,n}^{(J,+)} \Psi_n^+. \quad (2.31)$$

En adelante se omitirá el subíndice A , por simplicidad. Se desea comparar los espectros obtenidos, dados por

$$E_n^{(J,-)} = \varepsilon_n^- \varepsilon_{n-1}^+ \cdots \varepsilon_{n-(J-2)}^- \varepsilon_{n-(J-1)}^+, \quad E_n^{(J,+)} = \varepsilon_{n+1}^+ \varepsilon_n^- \cdots \varepsilon_{n-(J-3)}^+ \varepsilon_{n-(J-2)}^-, \quad (2.32)$$

para ello se definen

$$\tilde{E}_n^{(J,-)} \equiv \frac{E_n^{(J,-)}}{\varepsilon_n^- \varepsilon_{n-1}^+ \cdots \varepsilon_{n-(J-3)}^+ \varepsilon_{n-(J-2)}^-} = \varepsilon_{n-(J-1)}^+, \quad \tilde{E}_n^{(J,+)} \equiv \frac{E_n^{(J,+)}}{\varepsilon_n^- \varepsilon_{n-1}^+ \cdots \varepsilon_{n-(J-3)}^+ \varepsilon_{n-(J-2)}^-} = \varepsilon_{n+1}^+. \quad (2.33)$$

De esta manera es más fácil realizar la comparación entre $\tilde{E}_n^{(J,-)}$ y $\tilde{E}_n^{(J,+)}$, con lo cual $\varepsilon_{J+1}^+ = \varepsilon_J^-$,

y entonces $\tilde{E}_{n+J}^{(J,-)} = \tilde{E}_n^{(J,+)}$. En resumen los espinores propios obtenidos, son

$$\begin{pmatrix} \varphi_n^- \\ \varphi_{n-J}^- \end{pmatrix} = \Psi_n^- \quad \begin{pmatrix} \varphi_{n+1}^+ \\ \varphi_{n-(J-1)}^+ \end{pmatrix} = \Psi_n^+ \quad (2.34)$$

y los espectros se relacionan de la siguiente manera

$$E_{n+J}^{(J,-)} = E_n^{(J,+)} \quad (2.35)$$

para $J = 1, 2, 3, \dots$. Se puede observar que los espectros de energía difieren entre sí por J niveles.

Estos resultados se resumen en el cuadro 2.1 y en el esquema de la Fig. 2.1. Se puede observar el comportamiento entre espectros los cuales tienen una diferencia de J niveles al igual que las componentes del espinor propuesto en la Ec. (2.25).

Cuadro 2.1: Comparación entre espectros para J par

	Ψ_n^-	$\tilde{E}_n^{(J,-)}$	Ψ_n^+	$\tilde{E}_n^{(J,+)}$
Estado Base $n=0$			$\begin{pmatrix} \varphi_1^+ \\ 0 \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_0^+ = \varepsilon_1^+$
1 ^{er} Estado excitado $n = 1$			$\begin{pmatrix} \varphi_2^+ \\ 0 \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_1^+ = \varepsilon_2^+$
2 ^{do} Estado excitado $n = 2$			$\begin{pmatrix} \varphi_3^+ \\ 0 \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_2^+ = \varepsilon_3^+$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$n = J - 1$			$\begin{pmatrix} \varphi_J^+ \\ \varphi_0^+ \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_{J-1}^+ = \varepsilon_J^+$
$n = J$	$\begin{pmatrix} \varphi_J^- \\ \varphi_0^- \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_0^- = \varepsilon_J^- = \varepsilon_{J+1}^+$	$\begin{pmatrix} \varphi_{J+1}^+ \\ \varphi_1^+ \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_J^+ = \varepsilon_{J+1}^+$
$n = J + 1$	$\begin{pmatrix} \varphi_{J+1}^- \\ \varphi_1^- \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_{J+1}^- = \varepsilon_{J+1}^- = \varepsilon_{J+2}^+$	$\begin{pmatrix} \varphi_{J+2}^+ \\ \varphi_2^+ \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_{J+1}^+ = \varepsilon_{J+2}^+$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
n	$\begin{pmatrix} \varphi_n^- \\ \varphi_{n-J}^- \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_n^- = \varepsilon_n^- = \varepsilon_{n+1}^+$	$\begin{pmatrix} \varphi_{n+1}^+ \\ \varphi_{n-(J-1)}^+ \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_n^+ = \varepsilon_{n+1}^+$

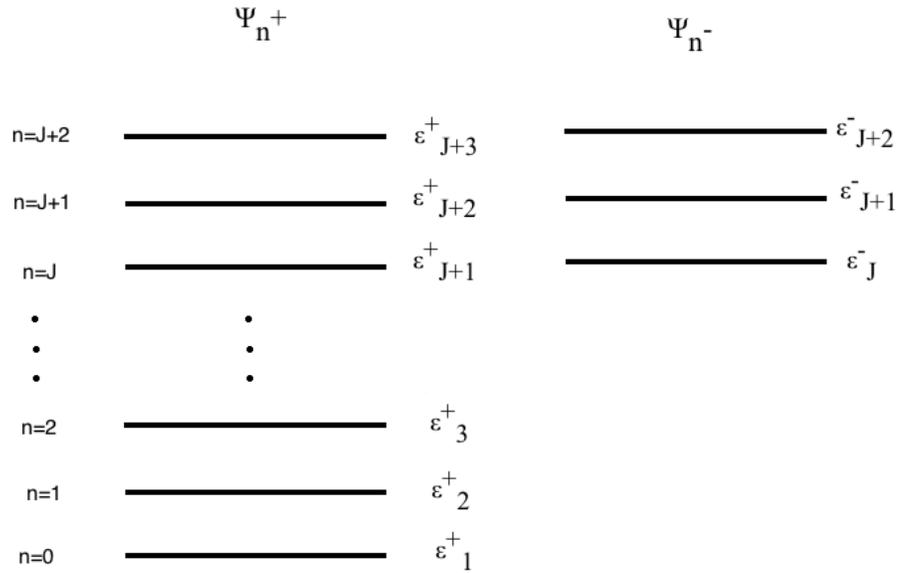


Figura 2.1: Esquema de los espectros para J par.

Para valores **impares de J** , a diferencia del caso anterior se tiene que hacer una propuesta diferente ya que el efecto de un operador de ascenso y descenso más hace la diferencia a la hora de proponer la solución, sin embargo, las componentes siguen estando a J niveles de diferencia.

Se puede pensar que los espinores tienen una forma parecida a los espinores de la monocapa. Es por esto que se propone el siguiente espinor como solución de $\mathcal{H}_A^{(J)}$, para J impar de la siguiente

manera

$$\Psi_n^-(x) = \begin{pmatrix} \varphi_n^-(x) \\ \varphi_{n-J}^+(x) \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

Primero se verifica que sea propio de $\mathcal{H}_A^{(J)}$ y se calcula su valor propio,

$$\mathcal{H}_A^{(J)}\Psi_n^- = \varepsilon_n^- \varepsilon_{n-1}^+ \cdots \varepsilon_{n-(J-2)}^+ \varepsilon_{n-(J-1)}^- \begin{pmatrix} \varphi_n^- \\ \varphi_{n-J}^+ \end{pmatrix} = E_{A,n}^{(J,-)}\Psi_n^- \quad (2.37)$$

con $E_{A,n}^{(J,-)} = \varepsilon_n^- \varepsilon_{n-1}^+ \cdots \varepsilon_{n-(J-1)}^-$. Ahora se propone una transformación \mathcal{L}_J^+ para obtener la solución completa de la Ec. (2.21),

$$\mathcal{L}_J^+ = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{n-1}^+}} L^+ & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{n-J+1}^-}} L^+ \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

aplicando la transformación a Ψ_n^- se obtiene Ψ_n^+ , esto es

$$\mathcal{L}_J^+\Psi_n^- = \begin{pmatrix} \varphi_{n+1}^+ \\ \varphi_{n-(J-1)}^- \end{pmatrix} = \Psi_n^+. \quad (2.39)$$

Y con \mathcal{L}_J^- una transformación propuesta de manera similar a la Ec. (2.28), se puede comprobar que regresamos a Ψ_n^- ,

$$\mathcal{L}_J^-\Psi_n^+ = \begin{pmatrix} \varphi_n^- \\ \varphi_{n-J}^+ \end{pmatrix} = \Psi_n^- \quad (2.40)$$

Ahora veamos cómo son los valores propios de Ψ_n^+

$$\mathcal{H}_A^{(J)} \Psi_n^+ = \varepsilon_{n+1}^+ \varepsilon_n^- \cdots \varepsilon_{n-(J-3)}^- \varepsilon_{n-(J-2)}^+ \begin{pmatrix} \varphi_{n+1}^+ \\ \varphi_{n-J+1}^+ \end{pmatrix} = E_{A,n}^{(J,+)} \Psi_n^+, \quad (2.41)$$

con

$$E_n^{(J,+)} = \varepsilon_{n+1}^+ \varepsilon_n^- \cdots \varepsilon_{n-(J-3)}^- \varepsilon_{n-(J-2)}^+. \quad (2.42)$$

De igual manera que el caso anterior se definen nuevos parámetros para así poder comparar los espectros de manera más sencilla:

$$\tilde{E}_n^{(J,-)} \equiv \frac{E_n^{(J,-)}}{\varepsilon_n^- \varepsilon_{n-1}^+ \cdots \varepsilon_{n-(J-3)}^- \varepsilon_{n-(J-2)}^+} = \varepsilon_{n-(J-1)}^-, \quad \tilde{E}_n^{(J,+)} \equiv \frac{E_n^{(J,+)}}{\varepsilon_n^- \varepsilon_{n-1}^+ \cdots \varepsilon_{n-(J-3)}^- \varepsilon_{n-(J-2)}^+} = \varepsilon_{n+1}^+ \quad (2.43)$$

Una comparación entre $\tilde{E}_n^{(J,-)}$ y $\tilde{E}_n^{(J,+)}$ dice que existe una diferencia entre espectros de la forma

$\varepsilon_{n+1}^+ = \varepsilon_n^-$, y por lo tanto

$$\tilde{E}_{n+J-1}^{(J,-)} = \tilde{E}_n^{(J,+)}. \quad (2.44)$$

Y entonces

$$E_{n+J-1}^{(J,-)} = E_n^{(J,+)}. \quad (2.45)$$

Se puede observar el comportamiento entre espectros los cuales tienen una diferencia de $J - 1$ niveles, lo cual difiere en un nivel con respecto al de J par.

Estos resultados se resumen en el cuadro 2.2 y en el esquema de la Fig. 2.2.

Cuadro 2.2: Comparación entre espectros para J impar

	Ψ_n^-	$\tilde{E}_n^{(J,-)}$	Ψ_n^+	$\tilde{E}_n^{(J,+)}$
Estado Base $n=0$			$\begin{pmatrix} \varphi_1^+ \\ 0 \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_0^+ = \varepsilon_1^+$
1 ^{er} Estado excitado $n = 1$			$\begin{pmatrix} \varphi_2^+ \\ 0 \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_1^+ = \varepsilon_2^+$
2 ^{do} Estado excitado $n = 2$			$\begin{pmatrix} \varphi_3^+ \\ 0 \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_2^+ = \varepsilon_3^+$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$n = J - 1$			$\begin{pmatrix} \varphi_J^+ \\ \varphi_0^- \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_{J-1}^+ = \varepsilon_J^+$
$n = J$			$\begin{pmatrix} \varphi_{J+1}^+ \\ \varphi_1^- \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_J^+ = \varepsilon_{J+1}^+$
$n = J + 1$	$\begin{pmatrix} \varphi_{J+1}^- \\ \varphi_1^+ \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_{J+1}^- = \varepsilon_{J+1}^- = \varepsilon_{J+2}^+$	$\begin{pmatrix} \varphi_{J+2}^+ \\ \varphi_2^- \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_{J+1}^+ = \varepsilon_{J+2}^+$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
n	$\begin{pmatrix} \varphi_n^- \\ \varphi_{n-J}^+ \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_n^- = \varepsilon_n^- = \varepsilon_{n+1}^+$	$\begin{pmatrix} \varphi_{n+1}^+ \\ \varphi_{n-(J-1)}^- \end{pmatrix}$	$\tilde{E}_n^+ = \varepsilon_{n+1}^+$

Resumiendo, en este capítulo se mostró cómo el Hamiltoniano efectivo de la multicapa de grafeno puede diagonalizarse mediante el formalismo SUSY-QM. Se mostró que los espinores solución dependen de las soluciones del Hamiltoniano efectivo de la monocapa. Es por eso que en adelante solo nos enfocaremos en resolver el problema de la monocapa, que está descrita por la ecuación de Dirac en su representación reducible de 4×4 , ya que con la ayuda de SUSY-QM se podrán obtener las soluciones de la multicapa.

En el siguiente capítulo se presentarán las bases para obtener el propagador fermiónico, de gran utilidad para estudiar la dinámica de los portadores de carga en la monocapa y, por lo tanto, de la multicapa de grafeno.

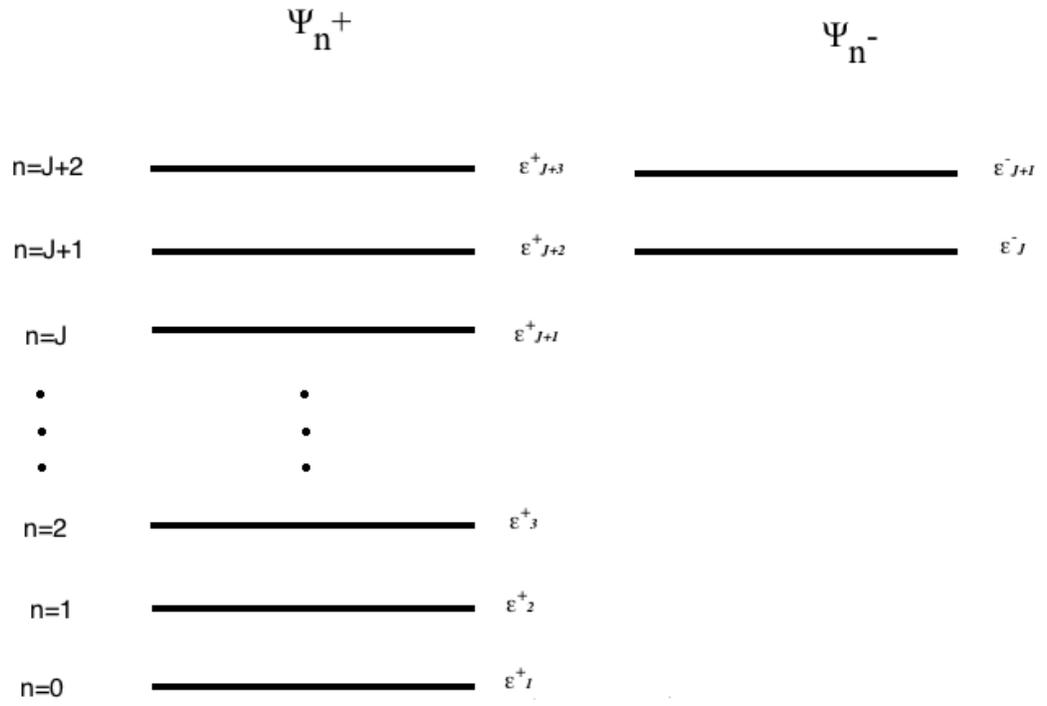


Figura 2.2: Esquema de los espectros para J impar.

Capítulo 3

Propagador Fermiónico

Dado que en este trabajo se busca una manera de estudiar las propiedades electromagnéticas del grafeno, las cuales están determinadas por el movimiento de los portadores de carga, en este capítulo se hace una revisión de las bases que permitirán conocer la evolución espacio-temporal de las partículas, lo cual se hace, de manera natural, a través del concepto de propagador. En este capítulo se obtiene de manera general el propagador de una partícula cuántica tanto en el régimen no relativista (ecuación de Schrödinger), como en el relativista (ecuación de Dirac). Se partirá de un principio fundamental (principio de Huygens) hasta llegar a obtener el propagador en el esquema de la segunda cuantización para el caso de la partícula libre y campo magnético uniforme. Esto servirá para ejemplificar la metodología que se utilizará en el capítulo 4 para obtener el propagador con campo magnético y eléctrico.

3.1. Propagador no relativista

En esta sección se tratará el problema de dispersión de partículas no relativistas. Interesa conocer cómo evoluciona la función onda de una partícula en el tiempo desde una condición inicial impuesta en el pasado para una energía dada. La ecuación de movimiento que describe la dinámica de estas partículas es la ecuación de Schrödinger:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0\right)\Psi(\vec{x}, t) = 0, \quad (3.1)$$

donde $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$ es el operador Hamiltoniano de una partícula libre y $\Psi(\vec{x}, t)$ es la función de onda que describe a los portadores de carga.

Una vez que se conoce la función de onda $\Psi(\vec{x}, t)$ y se desea conocer esta solución en otro punto (\vec{x}', t') , lo que se hace es emplear el formalismo de funciones de Green que se basa en el principio de Huygens. Este principio establece que si una partícula está descrita por la función de onda $\Psi(\vec{x}, t)$ al tiempo t , la función de onda de la partícula, $\Psi(\vec{x}', t')$, a un tiempo posterior t' en la posición \vec{x}' estará dada por la superposición de las ondas esféricas generadas por todos los puntos en el frente de onda, esto es

$$\theta(t' - t)\Psi(\vec{x}', t') = i \int d^3x G_0(\vec{x}', t'; \vec{x}, t)\Psi(\vec{x}, t), \quad (3.2)$$

donde G_0 es la función de Green y $\theta(t' - t)$ es la función escalón que toma en cuenta la causalidad en la propagación de la onda. Sustituyendo (3.2) en la ecuación (3.1) es fácil darse cuenta que

$G_0(\vec{x}', t'; \vec{x}, t)$ satisface la ecuación

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t'} - \hat{H}_0(\vec{x}') \right] G_0(\vec{x}' - \vec{x}, t' - t) = \delta^3(\vec{x}' - \vec{x}) \delta(t' - t) \quad (3.3)$$

que por construcción define el propagador retardado. En (3.3) se ha usado

$$G_0(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = G_0(\vec{x}' - \vec{x}, t' - t), \quad (3.4)$$

debido a la homogeneidad del espacio en el caso libre.

Para encontrar la forma explícita del propagador se utiliza la transformada de Fourier de $G_0(\vec{x}' - \vec{x}, t' - t)$, dada por

$$G_0(\vec{x}' - \vec{x}, t' - t) = \int \frac{d^3 p d\omega}{(2\pi)^4} e^{i\vec{p} \cdot (\vec{x}' - \vec{x}) - i\omega(t' - t)} G_0(p, \omega). \quad (3.5)$$

Sustituyendo en (3.3) y utilizando la descomposición de Fourier de la función delta de Dirac se obtiene que el propagador en el espacio de Fourier es

$$G_0(p, \omega) = \frac{1}{\omega - \frac{p^2}{2m} + i\epsilon}, \quad (3.6)$$

donde el término $i\epsilon$ garantiza la causalidad de la propagación.

Reemplazando (3.6) en (3.5), y utilizando el teorema integral de Cauchy se obtiene

$$G(\vec{x}' - \vec{x}, t' - t) = -i\theta(t' - t) \int \frac{d^3 p e^{i\vec{p} \cdot (\vec{x}' - \vec{x})}}{(2\pi)^3} e^{-iE(t' - t)}, \quad (3.7)$$

donde $E = p^2/(2m)$ es la energía de la partícula libre. Teniendo en cuenta que para el caso libre, las soluciones a la Ec. (3.1) son $\varphi_p(\vec{x}, t) = e^{i(Et - \vec{x} \cdot \vec{p})}$, el propagador de la ecuación anterior puede

ser escrito en términos de las soluciones de partícula libre de la siguiente manera

$$G_0(\vec{x}' - \vec{x}, t' - t) = -i\theta(t' - t) \int d^3p \varphi_p(\vec{x}, t) \varphi_p^*(\vec{x}', t'). \quad (3.8)$$

3.2. Propagador fermiónico de la partícula libre

Como se vio en el capítulo 1, la dinámica de los portadores de carga en el grafeno está regida por la ecuación de Dirac,

$$(\not{p} - m)\psi(x) = 0, \quad (3.9)$$

donde $\not{p} = \gamma_\mu \hat{p}^\mu$ con $\hat{p}^\mu = i\partial^\mu$ el operador de momentum, $p^\mu = (p^0, \vec{p})$, γ_μ las matrices de Dirac en la representación quirial,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

y con σ^i las matrices de Pauli. Las matrices de Dirac satisfacen el álgebra $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$ donde $g^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ es la métrica. Es importante notar que en el caso del propagador de los portadores de carga en el grafeno, el grado de libertad asociado al espín, llamado pseudoespín, aporta información de la localización de los portadores de carga con respecto a las subredes A y B. Como se mencionó en el capítulo 1, en lo sucesivo se referirá a este grado de libertad tan solo como espín.

Es fácil mostrar que la parte espacio-temporal de la función es una onda plana

$$\psi_s^{(+)} = u^s e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})}, \quad \psi_s^{(-)} = v^s e^{i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})}, \quad (3.11)$$

donde s es el grado de libertad de espín, \vec{p} es el vector de momentum y E la energía, que son las componentes del cuadvivector $p^\mu = (E, \vec{p})$ y satisfacen la relación de dispersión $E^2 - \vec{p}^2 = m^2$. u y v son los espinores correspondientes a energía positiva y negativa, respectivamente, que a continuación se determinan. Al sustituir (3.11) en (3.9) se obtiene la ecuación que satisface la parte espinorial de las soluciones, en particular para u se tiene la siguiente ecuación

$$(\gamma^\mu p_\mu - m)u^s = 0. \quad (3.12)$$

Escribiendo a las matrices de Dirac en términos de las matrices de Pauli y el biespinor u en términos de sus componentes, $u^T = (\omega, \omega')$, se obtiene

$$\begin{pmatrix} -m & \sigma \cdot p \\ \bar{\sigma} \cdot p & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega \\ \omega' \end{pmatrix} = 0, \quad (3.13)$$

donde se ha usado la siguiente notación

$$\sigma^\mu = (1, \vec{\sigma}), \quad \bar{\sigma}^\mu = (1, -\vec{\sigma}). \quad (3.14)$$

Teniendo en cuenta que la masa m puede escribirse como

$$m = \sqrt{(\sigma \cdot p)(\bar{\sigma} \cdot p)}, \quad (3.15)$$

es fácil darse cuenta que el biespinor solución es [24]

$$u^s = \begin{pmatrix} \sqrt{\sigma \cdot p} \eta^s \\ \sqrt{\bar{\sigma} \cdot p} \eta^s \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

donde η^s es un espinor unitario que generalmente se elige como espinor propio de σ^3 .

Para las soluciones de energía negativa se propone

$$\psi_s^{(-)} = v^s e^{i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})} \quad (3.17)$$

y sustituyendo en (3.9) obtenemos la ecuación que debe satisfacer el biespinor v^s

$$(-\gamma_\mu p_\mu - m)v^s = 0. \quad (3.18)$$

Teniendo en cuenta el invariante m , definido en la Ec. (3.15), y separando al biespinor en sus componentes, se obtiene

$$v^s = \begin{pmatrix} \sqrt{\sigma \cdot p} \eta^s \\ -\sqrt{\bar{\sigma} \cdot p} \eta^s \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Los biespinores adjuntos u^\dagger y v^\dagger se obtienen de resolver la ecuación

$$\bar{\psi}(\gamma_\mu \hat{p}^\mu - m) = 0 \quad (3.20)$$

donde $\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0$. Siguiendo un proceso análogo al descrito entre las Ecs. (3.12) a la (3.16) se obtienen las siguientes soluciones

$$\bar{u}^s = \begin{pmatrix} \eta^{s\dagger} \sqrt{\sigma \cdot p} & \eta^{s\dagger} \sqrt{\sigma \cdot p} \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

$$\bar{v}^s = \begin{pmatrix} -\eta^{s\dagger} \sqrt{\sigma \cdot p} & \eta^{s\dagger} \sqrt{\sigma \cdot p} \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

Algunas relaciones útiles que serán importantes en la construcción del propagador son

$$\bar{u}^s u^r = 2m\delta_{sr}, \quad (3.23)$$

$$\bar{v}^s v^r = -2m\delta_{sr}, \quad (3.24)$$

$$u^{s\dagger} u^r = 2E\delta_{sr}, \quad (3.25)$$

$$v^{s\dagger} v^s = 2E\delta_{sr}. \quad (3.26)$$

Con esta notación es muy sencillo calcular la suma sobre espines

$$\sum_s u^s \bar{u}^s = (\not{p} + m), \quad (3.27)$$

$$\sum_s v^s \bar{v}^s = (\not{p} - m). \quad (3.28)$$

3.2.1. Segunda cuantización del campo de Dirac

La existencia de energías negativas en las soluciones de la ecuación de Dirac exhibe un problema de inestabilidad, debido a que una partícula, al buscar el nivel de menor energía, emitirá una

cantidad infinita de ésta [23], lo cual no es físicamente posible. Para resolver este problema, Dirac formuló que todos los niveles de energía negativa estaban ocupados por partículas de la misma especie y, por el principio de exclusión de Pauli, estas no podían ocupar el mismo nivel de energía. La versión moderna de estas ideas es pensar que la solución de la ecuación de Dirac en realidad describe a un sistema con un número infinito de grados de libertad (un campo) [24] cuyos modos normales de vibración describen a las partículas [25].

Los fermiones, a diferencia de los bosones, cumplen con el principio de exclusión de Pauli, lo cual impide tener a dos partículas en el mismo estado cuántico. Por lo que la función de onda de varias partículas indistinguibles tiene que ser antisimétrica y cumplir con el álgebra de anticonmutadores.

Para el caso de partícula libre, la solución completa en el espacio de momentos es una combinación de estados de energía positiva y negativa que puede escribirse de la siguiente manera

$$\psi(x) = \sum_{s=\pm 1} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} N(p) [a_p^s u^s e^{-i(Et-\vec{p}\cdot\vec{x})} + b_p^{s*} v^s e^{i(Et-\vec{p}\cdot\vec{x})}]. \quad (3.29)$$

El proceso de la segunda cuantización consiste en promover los coeficientes del desarrollo anterior a operadores, los cuales crean o aniquilan partículas de momentum p y espín s , y satisfacen las siguientes reglas de anticonmutación

$$\begin{aligned} \{\hat{a}_p^s, \hat{a}_{p'}^{s'\dagger}\} &= \{\hat{b}_p^s, \hat{b}_{p'}^{s'\dagger}\} = (2\pi)^3 \delta_{ss'} \delta^3(\vec{p} - \vec{p}'), \\ \{\hat{a}_p^s, \hat{b}_{p'}^{s'\dagger}\} &= \{\hat{a}_p^s, \hat{a}_{p'}^{s'}\} = 0. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Los operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger son, respectivamente, operadores de aniquilación y creación de electrones, mientras que \hat{b} y \hat{b}^\dagger son operadores de creación y aniquilación de positrones, respectivamente.

El campo cuantizado de Dirac adquiere la siguiente forma

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{s=\pm 1} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} N(p) [\hat{a}_p^s u^s e^{-i(Et - \vec{p}\cdot\vec{x})} + \hat{b}_p^{s\dagger} v^s e^{i(Et - \vec{p}\cdot\vec{x})}], \quad (3.31)$$

donde $N(p)$ es una constante de normalización.

Es fácil verificar que el campo de Dirac preserva las reglas de anticonmutación de la Ec. (3.30), en la forma

$$\{\hat{\psi}_\alpha(x), \hat{\psi}_\beta^\dagger(x')\} \Big|_{t=t'} = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \delta_{\alpha\beta} \quad (3.32)$$

$$\{\hat{\psi}_\alpha(x), \hat{\psi}_\beta(x')\} = \{\hat{\psi}_\alpha^\dagger(x), \hat{\psi}_\beta^\dagger(x')\} = 0, \quad (3.33)$$

donde α y β indican las componentes espinoriales.

3.2.2. Propagador libre del campo de Dirac

Para calcular el propagador de la partícula libre primero es necesario conocer la normalización del campo de Dirac cuantizado, Ec. (3.31), así como su adjunto

$$\hat{\psi}^\dagger(y) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} N^*(p) \sum_{s=\pm 1} [\hat{a}_p^{s\dagger} u^{s\dagger} e^{ip\cdot x} + \hat{b}_p^s v^{s\dagger} e^{-ip\cdot x}]. \quad (3.34)$$

Por lo tanto, usando la Ec. (3.32) se obtiene

$$\{\hat{\psi}_\alpha(x), \hat{\psi}_\beta^\dagger(y)\} \Big|_{t=t'} = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} N(p) N^*(p) \sum_{s=\pm 1} [u_\alpha^s u_\beta^{s\dagger} e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})} + v_\alpha^s v_\beta^{s\dagger} e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}]. \quad (3.35)$$

Tomando en cuenta las identidades de las Ecs. (3.27) y (3.28), la ecuación anterior se reduce a lo siguiente

$$\{\hat{\psi}_\alpha(x), \hat{\psi}_\beta^\dagger(y)\} \Big|_{t=t'} = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} |N(p)|^2 2E e^{i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})} \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.36)$$

Comparando esta última ecuación con la Ec. (3.32), se observa que la constante de normalización tiene que ser

$$N(p) = \frac{1}{\sqrt{2E}}. \quad (3.37)$$

El propagador del campo de Dirac se calcula mediante el producto temporalmente ordenado de los campos normalizados:

$$\begin{aligned} S_F(x-y)_{\alpha\beta} &= \langle 0 | T(\hat{\psi}_\alpha(x), \hat{\psi}_\beta(y)) | 0 \rangle \\ &= \theta(t-t') \langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(x) \hat{\psi}_\beta(y) | 0 \rangle - \theta(t'-t) \langle 0 | \hat{\psi}_\beta(y) \hat{\psi}_\alpha(x) | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Usando la representación de Fourier de los operadores de campo

$$\hat{\psi}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2E}} \sum_{s=\pm 1} \left[\hat{a}_p^s u^s e^{-ip\cdot x} + \hat{b}_p^{s\dagger} v^s e^{ip\cdot x} \right], \quad (3.39)$$

$$\hat{\bar{\psi}}(y) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2E}} \sum_{s=\pm 1} \left[\hat{a}_p^{s\dagger} \bar{u}^s e^{ip\cdot y} + \hat{b}_p^s \bar{v}^s e^{-ip\cdot y} \right] \quad (3.40)$$

y teniendo en cuenta el álgebra (3.30), las relaciones (3.27) y (3.28) y la forma integral de la función θ ,

$$\theta(t-t') = \frac{1}{2\pi i} \int \frac{dw e^{-iw(t-t')}}{w+i\epsilon}, \quad (3.41)$$

el primer término de la Ec. (3.38) queda

$$\theta(t-t') \langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(x) \hat{\bar{\psi}}_\beta(y) | 0 \rangle = -\frac{1}{2\pi i} \int \frac{dw e^{-iw(t-t')}}{w+i\epsilon} (\not{p} + m)_{\alpha\beta} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E} e^{-i[E(t-t') - \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{y})]}. \quad (3.42)$$

Análogamente, la forma explícita del segundo término de la Ec. (3.38) es,

$$\theta(t'-t) \langle 0 | \hat{\bar{\psi}}_\beta(y) \hat{\psi}_\alpha(x) | 0 \rangle = -\frac{1}{2\pi i} \int \frac{dw e^{-iw(t'-t)}}{w+i\epsilon} (-\not{p} - m)_{\alpha\beta} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E} e^{i[E(t-t') - \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{y})]}. \quad (3.43)$$

Sustituyendo (3.42) y (3.43) en (3.38) se obtiene

$$S(x-y)_{\alpha\beta} = i(\not{p} + m)_{\alpha\beta} \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{1}{2E} e^{-i[p_0(t-t') - \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{y})]} \left[\frac{1}{p_0 - E + i\epsilon} + \frac{1}{-p_0 - E + i\epsilon} \right], \quad (3.44)$$

donde se han realizado los cambios de variable $w \rightarrow p_0 - E$ y $w \rightarrow -p_0 - E$ en las Ecs. (3.42) y (3.43), respectivamente. En la Ec. (3.43) adicionalmente se realizó un cambio de variable $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$.

Finalmente, simplificando la Ec. (3.44), el propagador de Feynman de una partícula libre es

$$S(x-y)_{\alpha\beta} = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{i(\not{p} + m)}{p_0^2 - E^2 + i\epsilon} e^{-ip \cdot (x-y)}. \quad (3.45)$$

En la siguiente sección aplicaremos este procedimiento para la obtención del propagador de una partícula cargada en presencia de un campo magnético.

3.3. Propagador con campo magnético uniforme

En esta sección se obtiene el propagador de una partícula cargada en presencia de un campo magnético uniforme y durante el proceso se obtienen las funciones de Ritus que permiten simplificar

este problema, de tal forma que se asemeja al problema de partícula libre que se resolvió en la sección anterior.

Se sabe que la ecuación de movimiento que describe la dinámica de una partícula en presencia de un campo electromagnético, en general es

$$(\hat{\mathbb{M}} - m)\psi = 0, \quad (3.46)$$

donde $\hat{\Pi}^\mu = \hat{p}^\mu - eA^\mu$, con $A^\mu = (\phi, \vec{A})$ el cuadripotencial. Consideremos el caso particular de un campo magnético uniforme a lo largo de la dirección z , cuyo potencial en la norma asimétrica, está dado por

$$A^\mu = (0, 0, Bx^1, 0). \quad (3.47)$$

A diferencia del caso libre, en este caso no se conoce de forma explícita la parte espacial de las soluciones, sin embargo, ésta se puede determinar fácilmente de la siguiente manera.

El formalismo SUSY-QM nos dice que el cuadrado de la ecuación de Dirac es supersimétrico de la mecánica cuántica. Este cuadrado se obtiene de aplicar el operador $(\hat{\mathbb{M}} + m)$ a la Ec.(3.46), de modo que al realizar el álgebra y simplificar, la ecuación diagonal que se obtiene es

$$\left(\hat{\Pi}^2 - \frac{e}{2}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu} - m^2\right)\psi = 0 \quad (3.48)$$

donde $e \equiv -|e|$ es la carga del electrón, $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$ y $eF^{\mu\nu} = i[\hat{\Pi}^\mu, \hat{\Pi}^\nu]$.

Usando la norma de la Ec. (3.47), la Ec. (3.48) toma la forma,

$$[\hat{\Pi}^2 - eB\Sigma^3 - m^2]\psi = 0 \quad (3.49)$$

donde $\Sigma^3 = i\gamma^1\gamma^2$ es el operador de espín en dirección z . Recordar que en el caso del grafeno, el pseudoespín de los portadores de carga está caracterizado por lo que aquí se está llamando espín.

El término $eB\Sigma^3$ describe la interacción del espín con el campo magnético. Con ayuda de los proyectores de espín definidos como

$$\Delta(s) = \frac{1}{2} (1 + s\Sigma^3) \quad (3.50)$$

donde $s = \pm 1$ corresponde al valor propio del espín a lo largo de la dirección del campo, la Ec. (3.49) puede reescribirse como

$$\sum_{s=\pm 1} \left[\hat{\Pi}^2 - eBs - m^2 \right] \Delta(s)\psi = 0 \quad (3.51)$$

donde se ha usado

$$\Sigma^3 = \sum_{s=\pm 1} s\Delta(s), \quad 1 = \sum_{s=\pm 1} \Delta(s). \quad (3.52)$$

Dado que $\Delta(s)$ es un proyector, al actuar sobre la función ψ se obtendrá solo una proyección que será linealmente independiente de la otra por construcción, por lo tanto, cada uno de los términos en la Ec. (3.51) debe de anularse por separado, esto es

$$\left[\hat{\Pi}^2 - eBs - m^2 \right] \psi_s = 0 \quad (3.53)$$

con $\psi_s = \Delta(s)\psi$. Por lo tanto la solución general será la superposición de las dos proyecciones

$$\psi = \sum_{s=\pm 1} \psi_s. \quad (3.54)$$

En el espacio de configuraciones, la Ec. (3.53) está dada por,

$$[(i\partial^0)^2 - (i\partial^1)^2 - (i\partial^2 - eBx^1)^2 - (i\partial^3)^2 + eBs - m^2] \psi_s = 0. \quad (3.55)$$

Dada la forma de la ecuación, dos posibles soluciones son

$$\psi_s^{(+)}(x) = e^{-i(Et - p^2x^2 - p^3x^3)} \chi_s^{(+)}(x^1) u_s, \quad (3.56)$$

$$\psi_s^{(-)}(x) = e^{i(Et - p^2x^2 - p^3x^3)} \chi_s^{(-)}(x^1) v_s, \quad (3.57)$$

donde u^s y v^s contienen la información espinorial. $\chi_s^{(\pm)}$ es una función escalar desconocida que se determina al sustituir alguna de las Ecs. (3.56) y (3.57) en la Ec. (3.53). Por ejemplo, para el caso de energía positiva, la ecuación a resolver es

$$\left[(-\partial^1)^2 - (p^2 - eBx^1)^2 - eBs - (p^3^2 + m^2 - E^2) \right] \chi_s^{(+)}(x^1) = 0. \quad (3.58)$$

Con el cambio de variable

$$\rho = \sqrt{2|eB|} \left(\frac{p^2}{eB} - x^1 \right), \quad (3.59)$$

la Ec. (3.58) adquiere la siguiente forma

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \left[\frac{\rho^2}{4} - \frac{1}{2} - n \right] \right\} \chi_s^{(+)}(\rho) = 0, \quad (3.60)$$

que es la ecuación diferencial cuyas soluciones son las funciones parabólicas cilíndricas $D_n(\rho)$.

Dado que el problema con campo magnético es un problema confinante debemos de exigir que las

soluciones sean de cuadrado integrable. Esto se garantiza exigiendo que el orden de las funciones parabólicas cilíndricas sea un entero positivo, de modo que la solución general para $\chi_s^{(+)}$ es

$$\chi_s^{(+)}(\rho) = N_n D_n(\rho) \quad (3.61)$$

donde el orden de la función parabólica cilíndrica es

$$\begin{aligned} n &= \frac{E^2 - (p^3 + m^2)}{2|eB|} + \frac{\text{sign}(eB)s - 1}{2}, \\ &\equiv l + \frac{\text{sign}(eB)s - 1}{2}, \end{aligned} \quad (3.62)$$

siendo sign la función signo. La constante de normalización es

$$N_n = \left(\frac{\sqrt{4\pi|eB|}}{n!} \right)^{1/2}. \quad (3.63)$$

De la Ec. (3.62) es claro ver que la energía está discretizada en los denominados niveles de Landau, esto es

$$E^2 = 2|eB|l + (p^3)^2 + m^2. \quad (3.64)$$

Con todo lo anterior se conoce completamente la parte espacio-temporal de la Ec. (3.56), el único término que falta determinar es la parte espinorial u^s de la solución. Para esto se sustituye la Ec. (3.56) en la Ec. (3.46), resultando

$$\sum_{s=\pm 1} \left[\gamma^0 \hat{\Pi}^0 - \gamma^3 \hat{\Pi}^3 - \gamma^2 (-is \hat{\Pi}^1 + \hat{\Pi}^2) - m \right] \psi_s^{(+)} = 0 \quad (3.65)$$

donde se han usado las propiedades de los proyectores de espín. Una vez que los operadores de momentum actúan sobre la parte espacio-temporal, la ecuación que se obtiene para la parte espinorial es,

$$\sum_{s=\pm 1} \left[\gamma^0 E - \gamma^3 p^3 - \sqrt{2|eB|} \gamma^2 \left(s \frac{\partial}{\partial \rho} + \text{sign}(eB) \frac{\rho}{2} \right) - m \right] \chi_s^{(+)} u_s = 0. \quad (3.66)$$

Teniendo en cuenta las propiedades de las funciones parabólicas cilíndricas, es fácil mostrar que se satisface la siguiente relación

$$\left(s \frac{\partial}{\partial \rho} + \text{sign}(eB) \frac{\rho}{2} \right) \chi_s^{(+)} = \text{sign}(eB) \sqrt{l} \chi_{-s}^{(+)}. \quad (3.67)$$

Usando esta relación en la Ec.(3.66) junto con $u_s = \Delta(s)u$, se obtiene

$$\sum_{s=\pm 1} \chi_s^{(+)} \Delta(s) \left[\gamma^0 E - \gamma^3 p^3 - \sqrt{2|eB|} \gamma^2 \left(\text{sign}(eB) \sqrt{2|eB|} l \right) - m \right] u = 0. \quad (3.68)$$

Esta ecuación se puede escribir de forma compacta definiendo

$$\bar{p}^\mu \equiv (E, 0, \text{sign}(eB) \sqrt{2|eB|} l, p^3), \quad (3.69)$$

de modo que la Ec. (3.68) se reduce a

$$\sum_{s=\pm 1} \chi_s^{(+)} \Delta(s) \left[\gamma^\mu \bar{p}_\mu - m \right] u = 0. \quad (3.70)$$

Como se puede observar esta ecuación es muy parecida al caso de los espinores de partícula libre, Ec. (3.12), por lo que sus soluciones serán análogas a las Ecs. (3.16) y (3.21), con la sustitución

$p^\mu \rightarrow \bar{p}^\mu$, esto es

$$u^s = \begin{pmatrix} \sqrt{\sigma \cdot \bar{p}} \eta^s \\ \sqrt{\bar{\sigma} \cdot \bar{p}} \eta^s \end{pmatrix}, \quad \bar{u}^s = \begin{pmatrix} \eta^{s\dagger} \sqrt{\bar{\sigma} \cdot \bar{p}} & , & \eta^{s\dagger} \sqrt{\sigma \cdot \bar{p}} \end{pmatrix}. \quad (3.71)$$

Una vez determinada la forma del espinor u^s ya se conocen completamente todos los elementos de las Ecs. (3.54) y (3.56). Por lo tanto las soluciones de energía positiva son

$$\psi^{(+)} = \sum_{s=\pm 1} e^{-i(Et-p^2x^2-p^3x^3)} \chi_s^{(+)}(x^1) \Delta(s) u \quad (3.72)$$

$$= \mathbb{E}_p^{(+)} u \quad (3.73)$$

donde

$$\mathbb{E}_p^{(+)} \equiv \sum_{s=\pm 1} e^{-i(Et-p^2x^2-p^3x^3)} \chi_s^{(+)}(x^1) \Delta(s) \quad (3.74)$$

son la denominadas funciones de Ritus.

De manera análoga para el caso de energía negativa la soluciones son

$$\psi^{(-)} = \sum_{s=\pm 1} e^{i(Et-p^2x^2-p^3x^3)} \chi_s^{(-)}(-x^1) \Delta(s) v \quad (3.75)$$

$$\equiv \mathbb{E}_p^{(-)} v. \quad (3.76)$$

Nótese que en este caso las funciones de Ritus juegan el papel de la onda plana en el caso libre, por lo que para este caso la solución completa se puede escribir de la siguiente manera,

$$\psi(x) = \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} N(p) \sum_{s=\pm 1} [a_p^s \mathbb{E}_p^{(+)} u_s + b_p^{s*} \mathbb{E}_p^{(-)} v_s], \quad (3.77)$$

con $N(p)$ una constante de normalización.

Con el objetivo de encontrar el propagador en este caso, se trabajará con el formalismo de la segunda cuantización (como se hizo en la sección 3.2.1 del caso libre). Para ello se promueven los coeficientes a_p^s y b_p^{s*} a operadores de aniquilación y creación, los cuales satisfacen las siguientes relaciones de anticonmutación,

$$\begin{aligned} \{\hat{a}_p^s, \hat{a}_{p'}^{s'\dagger}\} = \{\hat{b}_p^s, \hat{b}_{p'}^{s'\dagger}\} &= (2\pi)^2 \delta_{ll'} \delta_{ss'} \delta(p^2 - p'^2) \delta(p^3 - p'^3), \\ \{\hat{a}_p^s, \hat{b}_{p'}^{s'\dagger}\} &= \{\hat{a}_p^s, \hat{a}_{p'}^{s'}\} = 0. \end{aligned} \quad (3.78)$$

Los operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger aniquilan y crean electrones, mientras \hat{b} y \hat{b}^\dagger de crean y aniquilan de positrones, respectivamente. Así, el campo cuantizado de Dirac con campo magnético uniforme adquiere la forma

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} N(p) \sum_{s=\pm 1} \left[\hat{a}_p^s \mathbb{E}_p^{(+)} u_s + \hat{b}_p^{s\dagger} \mathbb{E}_p^{(-)} v_s \right]. \quad (3.79)$$

Siguiendo el mismo procedimiento del caso libre (sección 3.2.2) para calcular el propagador, es necesario determinar la constante de normalización $N(p)$ del campo cuantizado dado por la Ec. (3.79) así como de su adjunto,

$$\hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} N^*(p) \sum_{s=\pm 1} \left[\hat{a}_p^{s\dagger} u_s^\dagger \mathbb{E}_p^{(+)\dagger} + \hat{b}_p^s v_s^\dagger \mathbb{E}_p^{(-)\dagger} \right]. \quad (3.80)$$

Usando la Ec. (3.32) se obtiene

$$\begin{aligned} & \left. \{\hat{\psi}_\alpha(x), \hat{\psi}_\beta^\dagger(y)\} \right|_{t=t'} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} |N(p)|^2 \left[\mathbb{E}_p^{(+)}(x) (\vec{p} + m) \gamma^0 \mathbb{E}_p^{(+)\dagger}(y) + \mathbb{E}_p^{(-)}(x) (\vec{p} - m) \gamma^0 \mathbb{E}_p^{(-)\dagger}(y) \right]_{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (3.81)$$

donde se han usado las Ecs. (3.27) y (3.28) adaptadas al caso magnético. Esto se puede hacer ya que el espinor u satisface una ecuación tipo libre (véase Ec.(3.70)). De esta forma

$$\left. \{\hat{\psi}_\alpha(x), \hat{\psi}_\beta^\dagger(y)\} \right|_{t=t'} = \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} |N(p)|^2 (2E) \mathbb{E}_p^{(+)}(x) \mathbb{E}_p^{(+)\dagger}(y). \quad (3.82)$$

Comparando esta ecuación con la Ec. (3.32) y utilizando que las funciones de Ritus son un conjunto completo,

$$\int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \mathbb{E}_p^{(+)}(x) \mathbb{E}_p^{(+)\dagger}(y) = \delta(\vec{x} - \vec{y}) \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.83)$$

se observa que la constante de normalización tiene que ser

$$N(p) = \frac{1}{\sqrt{2E}}. \quad (3.84)$$

De este forma, las soluciones completas de las ecuación de Dirac escritas en términos de las funciones de Ritus son:

$$\hat{\psi}(x)_\alpha = \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \frac{1}{\sqrt{2E}} \sum_{s=\pm 1} \left[\hat{a}_p^s (\mathbb{E}_p^{(+)}(x) u_s)_\alpha + \hat{b}_p^{\dagger s} (\mathbb{E}_p^{(-)}(x) v_s)_\alpha \right], \quad (3.85)$$

$$\hat{\psi}(y)_\beta = \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{1}{\sqrt{2E}} \sum_{s=\pm 1} \left[\hat{a}_p^{s\dagger} \left(\bar{u}_s \bar{\mathbb{E}}_p^{(+)}(y) \right)_\beta + \hat{b}_p^s \left(\bar{v}_s \bar{\mathbb{E}}_p^{(-)}(y) \right)_\beta \right]. \quad (3.86)$$

Dadas estas soluciones, se puede calcular el producto temporalmente ordenado de la Ec. (3.38).

Con ayuda de la Ec. (3.78), las relaciones de los espinores dadas por las Ecs. (3.27) y (3.28) y la forma integral de la función θ , el primer término de la Ec. (3.38) es

$$\theta(t-t') \langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(x) \hat{\psi}_\beta(y) | 0 \rangle = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{dwe^{-iw(t-t')}}{w+i\epsilon} (\not{\mathbb{I}} + m)_{\alpha\lambda} \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{1}{2E} \left(\mathbb{E}_p^{(+)}(x) \bar{\mathbb{E}}_p^{(+)}(y) \right)_{\lambda\beta}. \quad (3.87)$$

Análogamente, la forma explícita del segundo término de la Ec. (3.38) es,

$$\theta(t'-t) \langle 0 | \hat{\psi}_\beta(y) \hat{\psi}_\alpha(x) | 0 \rangle = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{dwe^{iw(t-t')}}{w+i\epsilon} (-\not{\mathbb{I}} - m)_{\alpha\lambda} \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \frac{1}{2E} \left(\mathbb{E}_p^{(-)}(x) \bar{\mathbb{E}}_p^{(-)}(y) \right)_{\lambda\beta}. \quad (3.88)$$

Escribiendo juntos los términos (3.87) y (3.88) en (3.38) se obtiene

$$S(x-y)_{\alpha\beta} = i(\not{\mathbb{I}} + m)_{\alpha\lambda} \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E} \left(\mathbb{E}_p^{(+)}(x) \bar{\mathbb{E}}_p^{(+)}(y) \right)_{\lambda\beta} \left[\frac{1}{p_0 - E + i\epsilon} + \frac{1}{-p_0 - E + i\epsilon} \right], \quad (3.89)$$

donde se han realizado los cambios de variable $w \rightarrow p_0 - E$ y $w \rightarrow -p_0 - E$ en las Ecs. (3.87) y (3.88), respectivamente. En la Ec. (3.88) adicionalmente se realizó un cambio de variable $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ y se tomó en cuenta la propiedad de las funciones parabólicas cilíndricas $D_n(-x) = (-1)^n D_n(x)$.

Finalmente, simplificando la Ec. (3.89), el propagador de Feynman de una partícula en presencia

de un campo magnético como el considerado, es

$$S(x - y) = i \not{\int} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{\mathbb{E}_p^{(+)}(x)(\not{\vec{p}} + m)\overline{\mathbb{E}}_p^{(+)}(y)}{\bar{p}^2 - m^2 + i\epsilon} \quad (3.90)$$

donde

$$\bar{p}^\mu = (p^0, 0, \text{sign}(eB)\sqrt{2eBl}, p^3) \quad (3.91)$$

y se ha definido

$$\not{\int} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \equiv \sum_{l=0}^{\infty} \int \frac{dp^0 dp^2 dp^3}{(2\pi)^3}. \quad (3.92)$$

La expresión (3.90) se puede escribir en términos de las soluciones fuera de la capa de masa de la siguiente manera

$$S(x - y) = i \not{\int} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{1}{\bar{p}^2 - m^2 + i\epsilon} \sum_{s=\pm 1} \psi_s(x)\overline{\psi}_s(y), \quad (3.93)$$

con

$$\psi_s(x) = \mathbb{E}_p(x)w_s, \quad (3.94)$$

donde w_s puede ser un espinor de energía positiva o negativa, dependiendo del polo del propagador.

Nótese que en la Ec. (3.94) la función $\mathbb{E}_p(x)$ aparece en la misma forma que lo hace en la Ec. (3.73),

con la diferencia de que ésta está evaluada fuera de la capa de masa, es decir, tiene argumento

$$p^0 t - \vec{p} \cdot \vec{x}.$$

Con esto se concluye el cálculo del propagador de una partícula cargada en presencia de un campo magnético uniforme. En esta sección, al utilizar proyectores de espín, se obtuvieron de manera natural las funciones propias de Ritus que, de acuerdo a la Ec. (3.90), diagonalizan al operador $\hat{\Pi}$. La ventaja de este procedimiento es que la forma de los biespinores solución corresponden a los de la partícula libre.

En el siguiente capítulo se usará todo este formalismo para obtener el resultado central de esta tesis, el cual consiste en el cálculo del propagador en presencia de un campo magnético y eléctrico, ambos en la dirección perpendicular a los planos del grafeno.

Capítulo 4

Propagador con Campo Magnético y Eléctrico Uniformes

En este capítulo se usa el formalismo de la segunda cuantización desarrollado en el capítulo anterior para calcular el propagador con el producto temporalmente ordenado para campo magnético y eléctrico, ambos perpendiculares a los planos del grafeno.

Los resultados que se obtienen en este capítulo, representan la parte medular y novedosa del proyecto de tesis, ya que hasta donde se tiene conocimiento, este resultado no se encuentra reportado en la literatura. Por otro lado, lo novedoso del resultado también incluye un tratamiento del campo eléctrico en un esquema en el que éste presenta un comportamiento confinante, análogo al del campo magnético si, en lugar de trabajar en el espacio de Minkowski, se trabaja en el espacio

Euclidiano.

Para obtener el propagador en este caso, se deberán calcular las soluciones de la ecuación de Dirac, y al igual que en el problema con sólo campo magnético, de manera natural se obtendrán las funciones de Ritus. Esto permitirá proponer una expresión del propagador análoga a la dada por la Ec. (3.93), cuya validez podrá verificarse comparando con la expresión correspondiente obtenida por Schwinger [32].

4.1. Cálculo del propagador

Para obtener el propagador con campo magnético \vec{B} y eléctrico \vec{E} , ambos uniformes y perpendiculares a las capas del grafeno, es necesario conocer las soluciones de la ecuación de Dirac correspondiente, dada por la Ec. (3.46). La diferencia con el caso sólo magnético, será que ahora se trabajará en el espacio Euclidiano, esto porque el campo eléctrico en el espacio de Minkowski no es confinante, mientras que en el de Euclides se tendrá un problema análogo al del campo magnético que ya se trabajó en el capítulo anterior.

La transformación entre estos espacios radica en lo que se denomina la rotación de Wick [27]:

$$x_0 \rightarrow -ix_4, \quad \gamma_0 \rightarrow -i\gamma_4, \quad \vec{E} \rightarrow i\vec{E}. \quad (4.1)$$

Ahora los índices contravariantes o covariantes no tienen sentido en el espacio Euclidiano, pero el

producto interior de dos cuadvectores, con el cambio (4.1), cambia en la forma

$$(A^\mu B_\mu)_{Minkowski} \rightarrow -(A_\mu B_\mu)_{Euclides} \quad (4.2)$$

por lo que la ecuación de Dirac dada por la Ec. (3.46) cambia a la siguiente forma,

$$(\hat{\mathbb{H}} + m)\psi = 0 \quad (4.3)$$

donde $\hat{\Pi}_\mu = \hat{p}_\mu - eA_\mu$ con $\hat{p}_\mu \equiv -i\partial_\mu$.

Los campos \vec{E} y \vec{B} , ambos perpendiculares al plano de la multicapa de grafeno, se introducen mediante la norma

$$A_\mu = (-Ex_3, 0, Bx_1, 0). \quad (4.4)$$

Como se hizo mención anteriormente en la introducción, el objetivo de introducir el campo eléctrico en la dirección perpendicular al plano, es abrir la brecha de conducción. Al igual que en el caso magnético, para conocer la parte espacio-temporal de la función de onda es posible utilizar el formalismo SUSY-QM para resolver el problema de la multicapa conociendo las soluciones de la monocapa (ver capítulo 2). Este formalismo permite obtener una forma diagonal de la ecuación de Dirac, la cual tiene la siguiente estructura en el espacio Euclidiano

$$\left(\hat{\Pi}^2 + \frac{e}{2} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + m^2 \right) \psi = 0. \quad (4.5)$$

Para la norma dada por (4.4) la forma explícita de la ecuación anterior es

$$[\hat{\Pi}^2 - eE\gamma_5\Sigma_3 - eB\Sigma_3 + m^2]\psi = 0 \quad (4.6)$$

82CAPÍTULO 4. PROPAGADOR CON CAMPO MAGNÉTICO Y ELÉCTRICO UNIFORMES

donde $\gamma_5 \Sigma_3$ es el operador de momento dipolar eléctrico y Σ_3 el operador de momento magnético (espín). Adicionalmente a la interacción del espín con el campo magnético, el término $\gamma_5 \Sigma_3$ describe la interacción del dipolo eléctrico con el campo eléctrico.

Utilizando los proyectores

$$\Delta^E(r) = \frac{1}{2} (1 + r\gamma_5) , \quad \Delta^B(s) = \frac{1}{2} (1 + s\Sigma_3) \quad (4.7)$$

donde $s, r = \pm 1$, es posible reescribir la Ec. (4.6) de la siguiente manera

$$\sum_{s,r=\pm 1} \left[\hat{\Pi}^2 - s eB - rs eE + m^2 \right] \Delta^E(r) \Delta^B(s) \psi = 0 \quad (4.8)$$

donde se ha ocupado la Ec. (3.52) junto con las siguientes identidades

$$\gamma_5 = \sum_{r=\pm 1} r \Delta^E(r) , \quad 1 = \sum_{r=\pm 1} \Delta^E(r) . \quad (4.9)$$

Dado que $\psi_{s,r} \equiv \Delta^E(r) \Delta^B(s) \psi$ son proyecciones linealmente independientes, entonces cada uno de los términos de la Ec. (4.8) tienen que anularse de manera independiente, esto es

$$(\hat{\Pi}^2 - s eB - rs eE + m^2) \psi_{r,s} = 0 . \quad (4.10)$$

Siguiendo el análisis del capítulo anterior, en el espacio de configuraciones la Ec. (4.10) está dada por

$$\left[(-i\partial_4 + eEx_3)^2 + (-i\partial_1)^2 + (-i\partial_2 - eBx_1)^2 + (-i\partial_3)^2 - s eB - sr eE + m^2 \right] \psi_{s,r} = 0 . \quad (4.11)$$

Dos posibles soluciones a esta ecuación son

$$\psi_{s,r}^{(+)}(x) = e^{i(\varepsilon x_4 + p_2 x_2)} \chi_s(x_1) \chi_{s,r}(x_3) u_{s,r}, \quad (4.12)$$

$$\psi_{s,r}^{(-)}(x) = e^{-i(\varepsilon x_4 + p_2 x_2)} \chi_s(x_1) \chi_{s,r}(x_3) v_{s,r}. \quad (4.13)$$

Al reemplazar esta propuesta en la Ec. (4.10), queda

$$\left[(\varepsilon + eEx_3)^2 - (\partial_1)^2 + (p_2 - eBx_1)^2 - (\partial_3)^2 - s eB - sr eE + m^2 \right] \chi_s(x_1) \chi_{s,r}(x_3) = 0, \quad (4.14)$$

y usando separación de variables,

$$\frac{[-\partial_3^2 + (\varepsilon + eEx_3)^2 - eErs] \chi_{s,r}^E(x_3)}{\chi_{s,r}^E(x_3)} + \frac{[-\partial_1^2 + (p_2 - eBx_1)^2 - eBs] \chi_s^B(x_1)}{\chi_s^B(x_1)} + m^2 = 0. \quad (4.15)$$

La ecuación que satisface la parte con campo magnético es idéntica a la Ec. (3.58), por lo que las soluciones de la parte magnética son

$$\chi_s^B(\rho_B^x) = N_{n_B} D_{n_B}(\rho_B^x) \quad (4.16)$$

con $D_{n_B}(\rho_B^x)$ las funciones parabólicas cilíndricas de orden n_B ,

$$\begin{aligned} n_B &= \frac{\varepsilon_\perp^2}{2|eB|} + \frac{\text{sign}(eB)s - 1}{2} \\ &\equiv l_B + \frac{\text{sign}(eB)s - 1}{2} \end{aligned} \quad (4.17)$$

y argumento $\rho_B^x \equiv \sqrt{2|eB|} \left(\frac{p_2}{eB} - x_1 \right)$, donde ε_\perp^2 es una constante de separación.

Debido a que la parte eléctrica de la Ec. (4.15) vuelve a ser idéntica a la (3.58), entonces las soluciones son

$$\chi_{s,r}^E(\rho_E^x) = N_{n_E} D_{n_E}(\rho_E^x) \quad (4.18)$$

donde $D_{n_E}(\rho_E^x)$ las funciones parabólicas cilíndricas de orden n_E ,

$$n_E = \frac{\varepsilon_{\parallel}^2}{2|eE|} + \frac{\text{sign}(eE)rs - 1}{2} \quad (4.19)$$

$$\equiv l_E + \frac{\text{sign}(eE)rs - 1}{2}, \quad (4.20)$$

donde el argumento es $\rho_E^x \equiv \sqrt{2|eE|} \left(\frac{\varepsilon}{eE} + x_3 \right)$ y $\varepsilon_{\parallel}^2$ es una constante de separación que satisface la siguiente relación de dispersión

$$\varepsilon_{\parallel}^2 + \varepsilon_{\perp}^2 + m^2 = 0. \quad (4.21)$$

Hasta ahora ya se conoce la parte espacio-temporal de las soluciones a la ecuación de Dirac (4.3), falta determinar la parte espinorial de las mismas. En el caso particular de energía positiva, se sustituye la Ec. (4.12) en la Ec. (4.3), y se obtiene,

$$\sum_{s,r=\pm 1} \left[\gamma_4(isr\hat{\Pi}_3 + \hat{\Pi}_4) + \gamma_2(-is\hat{\Pi}_1 + \hat{\Pi}_2) + m \right] \psi_{s,r}^{(+)} = 0 \quad (4.22)$$

donde se han usado las propiedades de los proyectores dadas en las Ecs.(3.52) y (4.9). Cuando los operadores de momentum actúan sobre la parte espacio-temporal, se obtiene la siguiente ecuación que satisface la parte espinorial,

$$\sum_{s,r=\pm 1} \left[\sqrt{2|eE|} \gamma_4 \left(sr \frac{\partial}{\partial \rho_E} + \text{sign}(eE) \frac{\rho_E}{2} \right) + \sqrt{2|eB|} \gamma_2 \left(s \frac{\partial}{\partial \rho_B} + \text{sign}(eB) \frac{\rho_B}{2} \right) + m \right] \chi_{s,r}^E \chi_s^B u_{s,r} = 0. \quad (4.23)$$

Teniendo en cuenta las propiedades de las funciones parabólicas cilíndricas descritas por la Ec. (3.67), es fácil mostrar que la parte con campo eléctrico también satisface una relación equivalente,

de modo que la Ec. (4.23) puede reescribirse de la siguiente forma

$$\sum_{s,r=\pm 1} \chi_{s,r}^E \chi_s^B \Delta^E(r) \Delta^B(s) [\gamma_\mu \bar{p}_\mu + m] u = 0 \quad (4.24)$$

donde se ha definido

$$\bar{p}_\mu \equiv \left(\sqrt{2|eE|l_E}, 0, \sqrt{2|eB|l_B}, 0 \right). \quad (4.25)$$

De comparar la Ec. (4.24) con la Ec. (3.68) es fácil concluir que los espinores solución tienen la misma forma que la mostrada en la Ec. (3.71).

Por lo tanto, las soluciones de energía positiva son

$$\psi^{(+)} = \sum_{s,r=\pm 1} e^{i(\varepsilon x_4 + p_2 x_2)} \chi_s^B(x_1) \chi_{s,r}^E(x_3) \Delta^B(s) \Delta^E(r) u \quad (4.26)$$

$$\equiv \mathbb{E}_p^{(+)} u, \quad (4.27)$$

donde $\mathbb{E}_p^{(+)}$ son las funciones de Ritus.

De manera análoga, para el caso de energía negativa la soluciones son

$$\psi^{(-)} = \sum_{s,r=\pm 1} e^{-i(\varepsilon x_4 + p_2 x_2)} \chi_s^B(x_1) \chi_{s,r}^E(x_3) \Delta^B(s) \Delta^E(r) v \quad (4.28)$$

$$\equiv \mathbb{E}_p^{(-)} v. \quad (4.29)$$

De acuerdo al análisis que se siguió en el capítulo anterior, el siguiente paso sería calcular el producto temporalmente ordenado con estas soluciones y así obtener el propagador, sin embargo, en este punto se debe cambiar de estrategia debido a que la coordenada temporal x_4 y la coor-

denada espacial x_3 juegan los papeles de x_2 y x_1 , respectivamente, en el proceso de la segunda cuantización [28] en el caso con solo campo magnético.

La estrategia que se seguirá es proponer una forma del propagador análoga a la Ec. (3.93) y verificar si ésta puede ser llevada a una forma conocida, por ejemplo, como la del propagador de Schwinger [32].

La expresión del propagador que se propone es

$$S(x, y) = i \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{1}{\bar{p}^2 + m^2} \sum_{s=\pm 1} \psi_s(x) \bar{\psi}_s(y), \quad (4.30)$$

donde

$$\bar{p}_\mu = \left(\sqrt{2|eE|l_E}, 0, \sqrt{2|eB|l_B}, 0 \right) \quad (4.31)$$

se toma fuera de la capa de masa, es decir,

$$2|eE|l_E + 2|eB|l_B + m^2 \neq 0. \quad (4.32)$$

También se ha definido

$$\int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \equiv \sum_{l_B, l_E=0}^{\infty} \int \frac{dp_4 dp_2}{(2\pi)^2}. \quad (4.33)$$

Nótese que en el caso de campo eléctrico, la ventaja de trabajar en el espacio Euclidiano radica en el hecho de transformar un problema de dispersión en un problema confinante, donde los estados confinados resultantes son asociados con instantones [29, 30]. Este hecho se ve reflejado en que el

orden de las funciones parabólicas cilíndricas, que aparecen en las soluciones de las Ecs. (4.26) y (4.28), está discretizado.

Para verificar la Ec. (4.30) se sustituyen los espinores de las Ecs. (4.26) y (4.28), esto es

$$\begin{aligned}
S(x, y) &= i \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{\mathbb{E}_p(x)(m - \not{p})\bar{\mathbb{E}}_p(y)}{\bar{p}^2 + m^2} \\
&= i(-\not{M}_x + m) \int_0^\infty d\tau \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{-\tau(\bar{p}^2 + m^2)} \mathbb{E}_p(x)\bar{\mathbb{E}}_p(y)
\end{aligned} \tag{4.34}$$

donde se debe tener en cuenta que n , el orden de la función parabólica cilíndrica, debe ser mayor o igual a cero. En la segunda línea de la Ec. (4.34) se ha introducido una integral sobre el parámetro τ al cual se le denomina tiempo propio de Schwinger. Al realizar la suma sobre l_B y l_E , usando la forma integral de una de las funciones parabólicas cilíndricas, se obtiene,

$$\begin{aligned}
S(x, y) &= i(-\not{M}_x + m)\Phi(x, y) \\
&\times \frac{1}{8\pi} \int_0^\infty \frac{eBeEd\tau}{\sinh(eE\tau)\sinh(eB\tau)} e^{-\tau m^2} e^{-\left\{\frac{eE}{4\tanh(eE\tau)}(x-y)_\parallel^2 + \frac{eB}{4\tanh(eB\tau)}(x-y)_\perp^2\right\}} \\
&\times \left\{ e^{eB\tau} \Delta^B(+)[e^{eE\tau} \Delta^E(+)+e^{-eE\tau} \Delta^E(-)] + e^{-eB\tau} \Delta^B(-)[e^{eE\tau} \Delta^E(-)+e^{-eE\tau} \Delta^E(+)] \right\}
\end{aligned} \tag{4.35}$$

donde

$$\Phi(x, y) \equiv e^{i\frac{e}{2}(-E(x_4-y_4)(x_3+y_3)+B(x_2-y_2)(x_1+y_1))} \tag{4.36}$$

es la bien conocida fase de Schwinger, la cual considera la dependencia de la norma en el propagador fermiónico [31]. Los detalles de este cálculo se muestran en el apéndice B.

Esta forma del propagador concuerda con el resultado obtenido por Schwinger en [32], por lo cual la propuesta para el propagador dada por la Ec. (4.30) es correcta.

El proceso que se ha seguido en esta tesis pone de manifiesto que, para construir el propagador, es suficiente conocer las soluciones de la ecuación de Dirac y considerarlas fuera de la capa de masa, lo cual resulta muy útil cuando se trabaja con perfiles de campo electromagnético más realistas que el caso uniforme.

4.2. Aplicaciones

Las posibles aplicaciones del propagador que se ha obtenido en esta tesis podría permitir, por ejemplo, el estudio de la conductividad eléctrica de la multicapa de grafeno a lo largo de la dirección transversa a los planos.

Este estudio puede llevarse a cabo tomando en cuenta el Lagrangiano efectivo del fotón [33]

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4\pi}F_{\alpha\beta}F^{\alpha\beta} - \frac{1}{c}J_{\alpha}A^{\alpha} + A^{\alpha}\Pi_{\alpha\beta}A^{\beta},$$

en donde el último término es una corrección cuántica, que a orden más bajo en teoría de perturbaciones tiene asociado el diagrama de Feynman que se muestra en la figura 4.1.

$\Pi_{\alpha\beta}$ es el operador de polarización del fotón, el cual contiene información física sobre el sistema; su expresión analítica es

$$\Pi_{\alpha\beta} \equiv Tr(e\gamma_{\alpha}S e\gamma_{\beta}S),$$

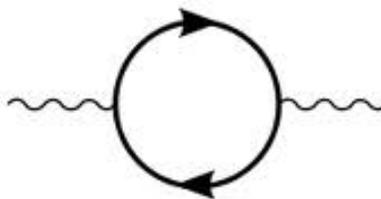


Figura 4.1: Diagrama de Feynman de la corrección cuántica a orden más bajo en teoría de perturbaciones.

donde S es el propagador calculado en esta tesis.

En particular, la conductividad eléctrica a lo largo de la dirección transversa a los planos del grafeno estará dada por

$$\sigma_{33} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Im} \tilde{\Pi}_{33}(\mathbf{0}, \omega + i0)}{\omega},$$

con $\tilde{\Pi}_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) \equiv \Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) - \Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, 0)$.

Conclusiones

En esta tesis se trabajó con un sistema de multicapas de grafeno. El objetivo fue calcular el propagador fermiónico de los portadores de carga del sistema en presencia de campos eléctrico y magnético externos, ambos perpendiculares a los planos de grafeno.

Hasta donde se tiene conocimiento, el resultado obtenido en esta tesis no se encuentra reportado en la literatura. Lo novedoso del proyecto consistió en un tratamiento del campo eléctrico en un esquema en el que éste presenta un comportamiento confinante, análogo al que se presenta con la interacción con campos magnéticos, para lo cual se trabajó en el espacio Euclidiano en vez de en el espacio de Minkowski.

Primeramente se realizó un estudio de la estructura cristalina de la monocapa y la multicapa de grafeno considerando interacciones a primeros vecinos. En ambos casos, se obtuvo el Hamiltoniano efectivo del sistema; ambos resultan ser una matriz de 2×2 con una estructura que puede ser llevada a un Hamiltoniano que cumple propiedades supersimétricas en el contexto de la mecánica cuántica (SUSY-QM). En el caso de la multicapa de grafeno, el Hamiltoniano efectivo del sistema

tiene una estructura similar al de la monocapa, es decir, como un Hamiltoniano de Dirac para partículas con velocidades que difieren de c , pero en el que el operador de momento aparece elevado a la J , donde J es el número de capas. Dicho Hamiltoniano efectivo es posible resolverlo con la ayuda del formalismo de la SUSY-QM, de tal forma que sus soluciones pueden expresarse en términos de las soluciones del Hamiltoniano efectivo de la monocapa. De esta forma, aprovechando el carácter SUSY-QM del sistema de interés, es posible obtener el propagador fermiónico para el caso de un sistema bidimensional más simple, como es el caso de la monocapa, y posteriormente, extender el problema al de la multicapa. Es por ello que este trabajo se centró en obtener el propagador fermiónico para una monocapa de grafeno.

El interés por obtener una expresión analítica y cerrada del propagador fermiónico en este caso, radica en que éste es útil para estudiar la dinámica de los portadores de carga en el grafeno.

En este trabajo se presentaron las bases para obtener el propagador fermiónico, desarrollando la teoría utilizando el principio de Huygens para obtener el propagador en el contexto de la teoría cuántica no relativista y de la teoría cuántica relativista hasta llegar al contexto de la teoría cuántica de campos, utilizando el formalismo de la segunda cuantización. En este último caso, se obtuvo el propagador para los tres casos siguientes: 1) partícula libre, 2) campo magnético uniforme perpendicular al plano del grafeno, y 3) campo eléctrico y magnético ambos uniformes y perpendiculares al plano del grafeno. Este último caso es la parte medular de la tesis.

Para obtener el propagador fermiónico, se determinaron las soluciones de la ecuación de Dirac

del problema correspondiente. Mediante el uso de proyectores de espín y de momento dipolar eléctrico, las soluciones a la ecuación de Dirac pueden expresarse en términos de las funciones propias de Ritus, las cuales tienen la propiedad de diagonalizar al operador $\hat{\Pi}$. El uso del formalismo de las funciones de Ritus facilita la obtención de las soluciones de la ecuación de Dirac con campo externo, ya que la ecuación diferencial a resolver se reduce a una ecuación de Dirac de partícula libre pero con cuadrimomentum \bar{p} , el cual contiene toda la información sobre la dinámica del problema.

A diferencia de lo que sucede con un campo magnético externo, la interacción de los portadores de carga del grafeno con un campo eléctrico externo, es no confinante. Por ello, para obtener el propagador en presencia de un campo eléctrico externo, se resolvió la ecuación de Dirac en el espacio Euclidiano. Esto permitió que el problema con campo eléctrico, de manera efectiva, se volviese confinante, mapeándose al caso sólo con campo magnético. De esta forma, el propagador con campo eléctrico y magnético, Ec. (4.34), se expresa sólo en términos de funciones de Ritus y del cuadrimomentum \bar{p} . Esta expresión coincide con el resultado bien conocido del propagador de Schwinger.

El proceso que se siguió en esta tesis para construir el propagador fermiónico, pone de manifiesto que para ello, es suficiente conocer las soluciones de la ecuación de Dirac y considerarlas fuera de la capa de masa, lo cual resulta de gran utilidad al considerar perfiles de campo electromagnético más realistas a los campos uniformes que pudiesen encontrarse en el laboratorio en el

estudio de multicapas de grafeno.

Apéndice A

Modelo del Grafeno con Campo Magnético

En este apéndice se introduce campo magnético uniforme al modelo del grafeno en su aproximación a primeros vecinos, dicho campo es perpendicular a las capas de grafeno. Como se vió en la sección 1.1, el Hamiltoniano de los portadores de carga en dicha aproximación resulta ser la ecuación de Dirac en $(2 + 1)D$ con masa cero. En la Ec. (1.20), el campo magnético se introduce utilizando la sustitución mínima

$$\hat{\Pi}^\mu \rightarrow \hat{p}^\mu - e\hat{A}^\mu, \quad (\text{A.1})$$

donde \vec{A} es el potencial vectorial que en $(2 + 1)D$ tiene la forma $\hat{A} = (\phi, A_x, A_y)$ y siendo ϕ el potencial eléctrico. Por lo que la ecuación (1.20) con campo en dirección z es,

$$H_D = v \begin{pmatrix} 0 & (\hat{p}_x - e\hat{A}_x) - i(\hat{p}_y - e\hat{A}_y) \\ (\hat{p}_x - e\hat{A}_x) + i(\hat{p}_y - e\hat{A}_y) & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

En este apéndice, para no perder generalidad, se trabaja con la ecuación de Dirac en (2+1)D para $m \neq 0$, que en términos de las matrices de Dirac γ^μ queda:

$$(\gamma^\mu \hat{\Pi}_\mu - m\mathbb{1})\Psi = 0. \quad (\text{A.3})$$

con γ^μ dada de la siguiente manera según la subred,

$$A : \quad \gamma^0 = \sigma^3, \quad \gamma^1 = i\sigma^1, \quad \gamma^2 = i\sigma^2, \quad (\text{A.4})$$

$$B : \quad \gamma^0 = \sigma^3, \quad \gamma^1 = i\sigma^1, \quad \gamma^2 = -i\sigma^2. \quad (\text{A.5})$$

Al igual que en la sección 1.1, se muestra solo el cálculo en la subred A. Multiplicando la ecuación (A.3) por γ^0 por el lado izquierdo

$$\gamma^0(\gamma^\mu \hat{\Pi}_\mu - m\mathbb{1})\Psi = 0, \quad (\text{A.6})$$

y utilizando la siguiente relación para expresar el producto de dos matrices de Dirac en la representación A

$$\gamma^\mu \gamma^\nu = g^{\mu\nu} - \epsilon^{\mu\nu\alpha} \gamma_\alpha, \quad (\text{A.7})$$

la ecuación (A.6) es:

$$\mathbb{1}E\Psi = (ic\gamma^1 \hat{\Pi}_2 - ic\gamma^2 \hat{\Pi}_1 + \gamma^0 mc^2)\Psi,$$

por lo que el Hamiltoniano de Dirac, en forma matricial corresponde a

$$\hat{H}_D = \begin{pmatrix} m & (\hat{\Pi}_2 + i\hat{\Pi}_1) \\ (\hat{\Pi}_2 - i\hat{\Pi}_1) & -m \end{pmatrix}.$$

Se observa que \hat{H} acopla las componentes del espinor. Pero \hat{H}_D^2 es diagonal y no acopla las componentes:

$$\hat{H}_D^2 = \begin{pmatrix} m^2 + (\hat{\Pi}_2 - i\hat{\Pi}_1)(\hat{\Pi}_2 + i\hat{\Pi}_1) & 0 \\ 0 & m^2 + (\hat{\Pi}_2 + i\hat{\Pi}_1)(\hat{\Pi}_2 - i\hat{\Pi}_1) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

$$\hat{H}_D^2\psi = \hat{H}_D(\hat{H}_D\psi) = \hat{H}_D(E\psi) = E\hat{H}_D\psi = E^2\psi \quad (\text{A.9})$$

Obsérvese que las funciones propias del Hamiltoniano \hat{H}_D son también funciones propias de \hat{H}_D^2 ; los cuadrados de los valores propios de \hat{H}_D son los valores propios de \hat{H}_D^2 .

Haciendo $\vec{\Pi} = \hat{\Pi}_2 + i\hat{\Pi}_1$ observamos que en la ecuación (A.8) los elementos de matriz son iguales y son $m^2 + \vec{\Pi}^2$. Por lo que podemos resolver una sola componente, recordando que la parte espinorial corresponde a los vectores propios del operador de pseudoespín $\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\sigma$. Los valores propios son $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ y los vectores propios son

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

Podemos observar cómo para el caso de partícula libre $A_\mu = 0$ y $\hat{\Pi} = \hat{p}$, $\hat{\Pi}^2 = \hat{p}^2$, pero en el caso general, al introducir un campo magnético es:

$$|\vec{\Pi}|^2 = \vec{\Pi}^\dagger \vec{\Pi} = \vec{\Pi} \vec{\Pi}^\dagger = \Pi^2 - \frac{\sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}}{2},$$

donde $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$ y $-ieF_{\mu\nu} = [\hat{\Pi}_\mu, \hat{\Pi}_\nu]$ el tensor de campo electromagnético.

Por lo que el cuadrado de la ecuación de Dirac en $(2+1)D$, para el caso de una partícula masiva en presencia de un campo magnético arbitrario, se puede resolver considerando solo la siguiente ecuación escalar incluyendo la parte espinorial en el valor propio del operador de pseudoespín σ que surgirá del tensor $\sigma^{\mu\nu}$ (por ejemplo $\sigma^{12} = \sigma^3$),

$$\left(m^2 + \hat{\Pi}^2 - \frac{\sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}}{2} \right) \psi = E^2 \psi. \quad (\text{A.11})$$

Para el campo magnético uniforme en dirección z la norma es

$$\hat{A}_\mu = (0, 0, Bx) \quad (\text{A.12})$$

El análogo a la Ec. (1.20) queda

$$H_D = v \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i(\hat{p}_y - eBx) \\ (\hat{p}_x + i(\hat{p}_y - eBx)) & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

de donde al calcular \hat{H}_D^2 una de las ecuaciones resultantes es

$$\left(m^2 + \hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y - eBx)^2 - \frac{e}{2}B \right) \psi = E^2 \psi, \quad (\text{A.14})$$

siendo ψ una de las componentes del espinor Ψ . Dicha ecuación diferencial tiene por solución una onda plana en una dimensión y un oscilador armónico desplazado en la otra [14]. Las energías para cada componente del espinor Ψ son,

$$E_n^{(+)} = \sqrt{2eB(n+1)}, \quad E_n^{(-)} = \sqrt{2eBn}. \quad (\text{A.15})$$

Así, utilizando el sustitución mínima, el acoplamiento del campo magnético con el pseudoespín de los portadores de carga en el grafeno, se manifiesta explícitamente en la Ec. (A.13).

Apéndice B

Verificación del Propagador

En este apéndice se muestran con detalle los cálculos realizados para verificar que la Ec. (4.30) es correcta. Para ello, se reescribe la Ec. (4.34) utilizando de forma explícita las funciones de Ritus de las Ecs. (4.26) y (4.28), esto es

$$\begin{aligned} S(x, y) &= i(-\not{\mathbb{I}}_x + m) \int_0^\infty d\tau \int \frac{dp_4 p_2}{(2\pi)^2} e^{-\tau m^2} e^{i[(x_4 - y_4)p_4 + (x_2 - y_2)p_2]} \\ &\times \sum_{l_B=0}^{\infty} e^{-\tau(2eBl_B)} \sum_{s=\pm 1} N_{n_B}^2 D_{n_B}(\rho_B^x) D_{n_B}(\rho_B^y) \\ &\times \sum_{l_E=0}^{\infty} e^{-\tau(2eEl_E)} \sum_{r=\pm 1} N_{n_E}^2 D_{n_E}(\rho_E^x) D_{n_E}(\rho_E^y) \Delta^E(r) \Delta^B(s). \end{aligned} \tag{B.1}$$

Sustituyendo la forma integral de una de las funciones parabólicas cilíndricas en la Ec. (B.2) y después de hacer algunas manipulaciones algebraicas, se obtiene

$$\begin{aligned}
S(x, y) &= i(-\mathbb{M}_x + m) \int_0^\infty d\tau \int \frac{dp_4 p_2}{(2\pi)^2} e^{-\tau m^2} e^{i[(x_4 - y_4)p_4 + (x_2 - y_2)p_2]} \\
&\times \sqrt{2eB} e^{\frac{1}{4}(\rho_B^x)^2} \int_{-\infty}^\infty dt_1 e^{-\frac{1}{2}t_1^2} e^{i\rho_B^x t_1} \sum_{l_B=0}^\infty \sum_{s=\pm 1} \frac{(-it_1)^{n_B} e^{-\tau(2eBl_B)}}{n_B!} D_{n_B}(\rho_B^y) \Delta^B(s) \\
&\times \sqrt{2eE} e^{\frac{1}{4}(\rho_E^x)^2} \int_{-\infty}^\infty dt_2 e^{-\frac{1}{2}t_2^2} e^{i\rho_E^x t_2} \sum_{l_E=0}^\infty \sum_{r=\pm 1} \frac{(-it_2)^{n_E} e^{-\tau(2eEl_E)}}{n_E!} D_{n_E}(\rho_E^y) \Delta^E(r).
\end{aligned} \tag{B.2}$$

Llevando a cabo la suma sobre s y r , y usando la identidad [34]

$$\sum_{n=0}^\infty \frac{t^n}{n!} D_n(z) = e^{-\frac{1}{4}z^2 + zt - \frac{1}{2}t^2} \tag{B.3}$$

en cada uno de los términos de la Ec. (B.2), se obtiene

$$\begin{aligned}
S(x, y) &= i(-\mathbb{M}_x + m) \int_0^\infty d\tau \int \frac{dp_4 p_2}{(2\pi)^2} e^{-\tau m^2} e^{i[(x_4 - y_4)p_4 + (x_2 - y_2)p_2]} \\
&\times \sqrt{2eB} e^{\frac{1}{4}[(\rho_B^x)^2 - (\rho_B^y)^2]} \int_{-\infty}^\infty dt_1 e^{-\frac{1}{2}t_1^2 [1 - (e^{-(2eB\tau)})^2]} e^{it_1[\rho_B^x - \rho_B^y e^{-(2eB\tau)}]} \\
&\times \sqrt{2eE} e^{\frac{1}{4}[(\rho_E^x)^2 - (\rho_E^y)^2]} \int_{-\infty}^\infty dt_2 e^{-\frac{1}{2}t_2^2 [1 - (e^{-(2eE\tau)})^2]} e^{it_2[\rho_E^x - \rho_E^y e^{-(2eE\tau)}]} \\
&\times \left\{ \Delta^B(+)[\Delta^E(+)+e^{-2eE\tau}\Delta^E(-)] + e^{-2eB\tau}\Delta^B(-)[\Delta^E(-)+e^{-2eE\tau}\Delta^E(+)] \right\}.
\end{aligned} \tag{B.4}$$

Las integrales restantes son del tipo Gaussianas, por lo que al realizar las integrales sobre t_1 , t_2 y los momentum p_2 y p_4 , se obtiene la Ec. (4.35) para un campo electromagnético externo

$$\begin{aligned}
S(x, y) &= i(-\not{V}_x + m) e^{i\frac{e}{2}(-E(x_4 - y_4)(x_3 + y_3) + B(x_2 - y_2)(x_1 + y_1))} \\
&\times \frac{1}{8\pi} \int_0^\infty \frac{eB e E d\tau}{\sinh(eE\tau) \sinh(eB\tau)} e^{-\tau m^2} e^{-\left\{ \frac{eE}{4 \tanh(eE\tau)} (x-y)_\parallel^2 + \frac{eB}{4 \tanh(eB\tau)} (x-y)_\perp^2 \right\}} \\
&\times \left\{ e^{eB\tau} \Delta^B(+)[e^{eE\tau} \Delta^E(+)] + e^{-eE\tau} \Delta^E(-) \right\} + e^{-eB\tau} \Delta^B(-) \left\{ e^{eE\tau} \Delta^E(-) + e^{-eE\tau} \Delta^E(+)} \right\}
\end{aligned} \tag{B.5}$$

donde $x_\parallel^2 \equiv x_4^2 + x_3^2$ y $x_\perp^2 \equiv x_1^2 + x_2^2$.

Nótese que adicionalmente se ha obtenido el factor exponencial

$$\Phi(x, y) \equiv e^{i\frac{e}{2}(-E(x_4 - y_4)(x_3 + y_3) + B(x_2 - y_2)(x_1 + y_1))} \tag{B.6}$$

el cual es bien conocido como la fase de Schwinger, la cual contiene toda la dependencia en la norma del campo electromagnético en el propagador fermiónico. Para la norma en la que se ha desarrollado todo este análisis, $A_\mu(z) = (-Ez_3, 0, Bz_1, 0)$, la fase de Schwinger puede reescribirse como

$$\Phi(x, y) = e^{ie \int_y^x dz_\mu A_\mu(z)} \tag{B.7}$$

donde la integral se realiza a lo largo de la línea recta que une los puntos x y y .

Notése que en el límite $eB \rightarrow 0$ y $eE \rightarrow 0$, la ecuación anterior se reduce a

$$\begin{aligned}
 S(x, y) &= i(-\not{p}_x + m) \\
 &\times \frac{1}{8\pi} \int_0^\infty d\tau \frac{e^{-\tau m^2}}{\tau^2} e^{-\left[\frac{(x_4-y_4)^2}{4\tau} + \frac{(x_1-y_1)^2}{4\tau} + \frac{(x_2-y_2)^2}{4\tau} + \frac{(x_3-y_3)^2}{4\tau}\right]}
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

el cual es el propagador fermiónico en ausencia de campo electromagnético externo en el espacio Eucladiano.

Bibliografía

- [1] A. O'Hare, F. V. Kusmartsev, and K. I. Kugel, *Nano Lett.* **12**, 1045 (2012).
- [2] T. Lee, et. al., *Chem. Mater.* **27**, 3785 (2015).
- [3] M. Skoda, et. al., *Journal of Nanomaterials* **2014**, 11 (2014).
- [4] K. S. Novoselov, et. al., *Nature* **490**, 192, (2005).
- [5] K. S. Mali, et. al., *Nanoscale* **7**, 1566 (2015).
- [6] E. Oyuervides Muñoz, *CIENCIACIERTA* N. 24, diciembre (2011).
- [7] L. H. Hess, M. Seifert and J. A. Garrido, *Proceedings of the IEEE* **101**, 1780 (2013).
- [8] A. H. Castro Neto, et. al., *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [9] K. Fai Mak, et. al., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 256405 (2009).
- [10] J. Jia, et al., *Phys. Rev. B* **88**, 205428 (2013).

- [11] M. Koshino, Phys. Rev. B **81**, 125304 (2010).
- [12] F. Rana, Lecture on “Energy Bands in Graphene: Tight Binding and the Nearly Free Electron Approach”, Cornell University, consultado el 10 de marzo de 2016. Disponible en <https://courses.cit.cornell.edu/mse5470/handout11.pdf>
- [13] A. J. Leggett, Lecture on “Graphene: Electronic band structure and Dirac fermions”, University of California Santa Barbara, consultado el 10 de marzo de 2016. Disponible en <http://web.physics.ucsb.edu/phys123B/w2015/leggett-lecture.pdf>
- [14] J. M. González, *Electrones planares en un campo magnético* Tesis de Maestría, Instituto de Física y Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo (2012).
- [15] E. McCann and M. Kochino, Rep. Prog. Phys. **76**, 056503 (2013).
- [16] M. S. Dresselhaus and G. Dresselhaus, Adv. Phys., **51**, 1 (2002).
- [17] R. Zavaleta, *Estados Magnéticos de Frontera en el Grafeno*, Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM (2011).
- [18] M. Koshino and E. McCann, Phys. Rev. B **87**, 045420 (2013).
- [19] M. Koshino and E. McCann, Phys. Rev. B **80**, 165409 (2009).
- [20] M. Kochino and T. Ando, Phys. Rev. B **76**, 085425 (2007).

- [21] C. H. Lui, et. al., *Nature Physics* **7**, 944 (2011).
- [22] F. Cooper, et. al., *Supersymmetry in Quantum Mechanics*, World Scientific (2001).
- [23] J. M. Bjorken and S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics*, Mcgraw-Hill, Vol 1, (1964).
- [24] M. Peskin and D. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Ed. Addison-Wesley (1995).
- [25] W. N. Cottingham and D. A. Greenwood, *An Introduction to the Standard Model of Particle Physics*, 2nd Edition, (2007).
- [26] J. M. Bjorken and S. D. Drell, *Relativistic Quantum Fields*, Mcgraw-Hill, Vol 2 (1965).
- [27] E. J. Ferrer et. al., *Nucl. Phys. B*, **864**, 469 (2012).
- [28] A. I. Nikishov, *Nuclear Physics B*, **21**, 346 (1970).
- [29] R. Soldati and L. Sorbo, *Phys. Lett. B*, **46**, 82 (1998).
- [30] S. P. Kim and D. N. Page, *Phy Rev. D*, **65**, 105002 (2002).
- [31] A. Chodos, K. Everding and D. Owen *Phys. Rev. D* **42**, 2881 (1990), Eq.(4.5).
- [32] J. Schwinger, *Phys. Rev.* **82**, 664 (1951).
- [33] W. Dittrich and M. Reuter, *Effective Lagrangians in Quantum Electrodynamics*, Springer-Verlag, Berlin (1985).

- [34] H. Bateman, *Higher Transcendental Functions*, McGraw-Hill Book Company (1953).