



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**Efectos cuasirelativistas del grafeno en interacción con  
campos electromagnéticos**

Tesis

que para optar por el grado de:  
Doctor en ciencias (física)

Presenta:

Enrique Milpas Rosas

Tutor: Dr. Manuel Torres Labansat  
Instituto de Física UNAM

Miembros del comité tutor:  
Dr. Genaro Toledo Sánchez, IF-UNAM  
Dr. Sarira Sahu, ICN-UNAM

Ciudad Universitaria, Cd. Mx.

Noviembre, 2017



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. El grafeno . . . . .	7
1.2. Tunelaje de Klein . . . . .	15
1.2.1. Dispersión por una barrera electrostática . . . . .	16
1.3. Contenido . . . . .	21
<b>2. Grafeno en interacción con un campo eléctrico constante: producción de pares electrón-hueco</b>	<b>24</b>
2.1. Mecanismo de Schwinger . . . . .	25
2.2. Grafeno en presencia de campos electromagnéticos dependien- tes del tiempo . . . . .	27
2.2.1. Formalismo general . . . . .	27
2.2.2. Corriente eléctrica . . . . .	30
2.2.3. Expansión de Magnus . . . . .	31
2.2.4. Expansión de Magnus-Floquet . . . . .	33
2.3. Campo eléctrico constante . . . . .	34
2.3.1. Producción de pares electrón-hueco . . . . .	35
2.3.2. Corriente eléctrica . . . . .	46
<b>3. Grafeno irradiado por una onda electromagnética</b>	<b>52</b>
3.1. Polarización lineal, ecuación de evolución . . . . .	53
3.1.1. Solución exacta, propagación longitudinal . . . . .	53
3.1.2. Formalismo de Floquet . . . . .	54
3.1.3. Formalismo de Magnus-Floquet, corriente no-lineal . .	61
3.2. Polarización circular . . . . .	68

<b>4. Grafeno en interacción con un campo electromagnético cuantizado</b>	<b>73</b>
4.1. Hamiltoniano fotón-grafeno y cantidades conservadas . . . . .	74
4.2. Modelo de Jaynes-Cummings en el punto de Dirac . . . . .	78
4.3. Cuasipartículas electrón-fotón . . . . .	79
4.3.1. Límite semiclásico . . . . .	89
4.3.2. Caso cuántico . . . . .	90
4.4. Colapsos y resurgimientos en paquetes de onda en grafeno . .	92
4.4.1. Oscilaciones de Rabi . . . . .	93
4.4.2. Colapsos y resurgimientos: distribución coherente de fotones $\rho(n, \bar{n})$ . . . . .	97
4.4.3. Colapsos y resurgimientos: efectos de la distribución de momentos $\rho(k)$ . . . . .	102
4.4.4. Interferencia debida a la distribución de fotones $\rho(n, \bar{n})$ y de momentos $\rho(k)$ . . . . .	105
4.5. Brecha de energía en $k = \omega/2v_F$ . . . . .	108
<b>5. Grafeno con campo magnético</b>	<b>111</b>
5.1. Campo magnético uniforme . . . . .	112
5.2. Barrera magnética con perfil hiperbólico . . . . .	116
5.2.1. Estados ligados . . . . .	117
5.2.2. Dispersión . . . . .	125
<b>6. Conclusiones</b>	<b>131</b>
<b>A. Método de álgebras de Lie</b>	<b>135</b>
<b>B. Corrientes para campo eléctrico polarizado linealmente</b>	<b>137</b>

## Resumen

En esta tesis estudiamos la dinámica de los portadores de carga del grafeno en interacción con campos electromagnéticos. Pusimos énfasis en analizar aspectos análogos a los que aparecen en la electrodinámica cuántica, a los que llamamos fenómenos cuasirelativistas o pseudorelativistas. Estos fenómenos se originan debido a que la dinámica de los portadores de carga a bajas energías se puede modelar por la ecuación de Dirac para partículas de masa nula.

En el caso del campo eléctrico constante en el límite de campo débil, encontramos que la corriente eléctrica es dominada por la corriente de polarización. La corriente se caracteriza por la conductividad  $\sigma = e^2/4\hbar$ , que coincide en orden de magnitud con el valor observado para la conductividad mínima del grafeno.

En el límite de campo intenso se obtuvo una expresión analítica explícita para la producción de pares electrón-hueco como función del tiempo  $n(t)$ . Se encontró que existen dos regímenes separados por el tiempo de Schwinger  $t_S$ . Para tiempos cortos  $t < t_S$  la producción de pares tiene una dependencia cuadrática tanto en el tiempo como en el campo eléctrico. Mientras que para  $t > t_S$  la producción de pares es lineal en el tiempo y tiene una dependencia  $E_0^{3/2}$  en el campo eléctrico. En este régimen la corriente eléctrica está dominada por la corriente de conducción y es proporcional a la densidad del número de pares electrón-hueco  $n(t)$ .

En el caso del grafeno en interacción con una onda electromagnética clásica, consideramos inicialmente el caso de polarización lineal. En el límite en el que los portadores de carga se propagan paralelamente a la dirección de polarización de la onda obtuvimos una solución analítica explícita. En el caso general determinamos numéricamente el espectro de cuasienergías. Encontramos que en el punto de Dirac  $\kappa = 0$  no se generan brechas. Determinamos la corriente eléctrica inducida por la onda electromagnética con polarización lineal. Corroboramos que los efectos no-lineales dan lugar a la generación de armónicos impares de orden mayor. Adicionalmente calculamos los campos de radiación inducida, lo cual nos permitió estimar el orden de magnitud de la intensidad de la radiación para el primer y tercer armónico.

En el caso de irradiación por una onda polarizada circularmente encontramos que siempre se produce una brecha en los puntos de Dirac  $\kappa = 0$ .

Adicionalmente observamos que conforme aumenta el valor del acoplamiento  $\lambda$ , se abren sucesivamente brechas en los siguientes puntos de cruce.

Al estudiar la interacción del grafeno con un campo electromagnético cuantizado, implementamos un método que nos permitió encontrar una solución analítica aproximada. Uno de los resultados más importantes es que cuando el grafeno es irradiado por una onda electromagnética polarizada circularmente se generan estados ligados electrón-fotón, que representan cuasipartículas masivas con una relación de dispersión relativista.

Contar con una solución analítica explícita nos permitió estudiar la evolución temporal de paquetes de onda. Consideramos el efecto combinado de la luz coherente con una distribución de momentos. Se encuentra toda una estructura novedosa, como resurgimientos seccionados o suprimidos dependiendo de los valores de los parámetros. Lo anterior es resultado de la interferencia entre la modulación producida por el estado coherente de fotones y la distribución de momentos.

En el último capítulo estudiamos al grafeno en interacción con un campo magnético en forma de barrera con un perfil suave tipo hiperbólico. Las ecuaciones de Dirac que describen el problema se pueden analizar dentro del formalismo de la mecánica cuántica supersimétrica. Encontramos una solución analítica compacta para la función de onda de los portadores de carga así como una fórmula para sus eigenvalores.

Al estudiar el problema de dispersión obtuvimos una fórmula compacta para el coeficiente de transmisión, esto nos permitió identificar condiciones resonantes en las que la barrera se vuelve transparente. Sin embargo, en general encontramos que la barrera puede actuar como filtro ya que solo energías y direcciones específicas de los electrones incidentes pueden atravesarla.

# Capítulo 1

## Introducción

El grafeno [1] se ha convertido en un tema de intenso estudio y ha despertado un enorme interés a partir de su descubrimiento experimental en 2004 [2]. Esto se debe a sus propiedades extraordinarias que prometen dar lugar a diversos desarrollos tecnológicos, en particular se considera que láminas de grafeno podrían llegar a sustituir a los semiconductores tradicionales.

En los estudios previos de semiconductores en heteroestructuras se consideraba al sistema como bidimensional, a pesar de que en realidad el grosor del mismo comprendía entre 10 a 100 capas atómicas. En cambio el grosor del grafeno corresponde a una sola capa de átomos de carbono arreglados en una estructura hexagonal, tipo panal de abeja. El grafeno es el primer ejemplo de un cristal verdaderamente bidimensional. Por lo anterior con el grafeno el estudio de la física de electrones confinados en sistemas bidimensionales cobra renovado interés. Cabe señalar que aparte del grafeno, más recientemente otras formas de cristales bidimensionales han sido obtenidos; tal es el caso del siliceno y del germaneno [3, 4].

El grafeno se había estudiado teóricamente por más de medio siglo. En 1947 P. R. Wallace [5] analizó la estructura de bandas del grafeno, encontrando que presentaba un comportamiento inusual semi-metálico, con una relación de dispersión lineal alrededor del punto de contacto entre bandas. Esto da lugar a excitaciones electrónicas descritas por la ecuación de Dirac [6]. Se dice que el grafeno tiene un comportamiento semi-metálico [7], ya que no existe una brecha entre las excitaciones de valencia y las de conducción. Sin embargo se consideraba que no era posible aislar experimentalmente sistemas estrictamente bidimensionales. Lo anterior se debe a que existían consideraciones teóricas que hacían pensar que las estructuras bidimensionales eran

inestables debido a las fluctuaciones térmicas de largo alcance, de acuerdo al teorema de Mermin-Wagner [8]. La paradoja se resolvió al comprobar que, si bien el grosor del grafeno es el de una sola capa de átomos, el sistema es estabilizado por distorsiones transversales de la red, por lo cual en realidad una capa de grafeno suspendido muestra pequeñas corrugaciones, las cuales han sido observadas experimentalmente [9] (En la figura 1.1 se observa una representación artística). En otras palabras el grafeno es bidimensional pero no es plano.

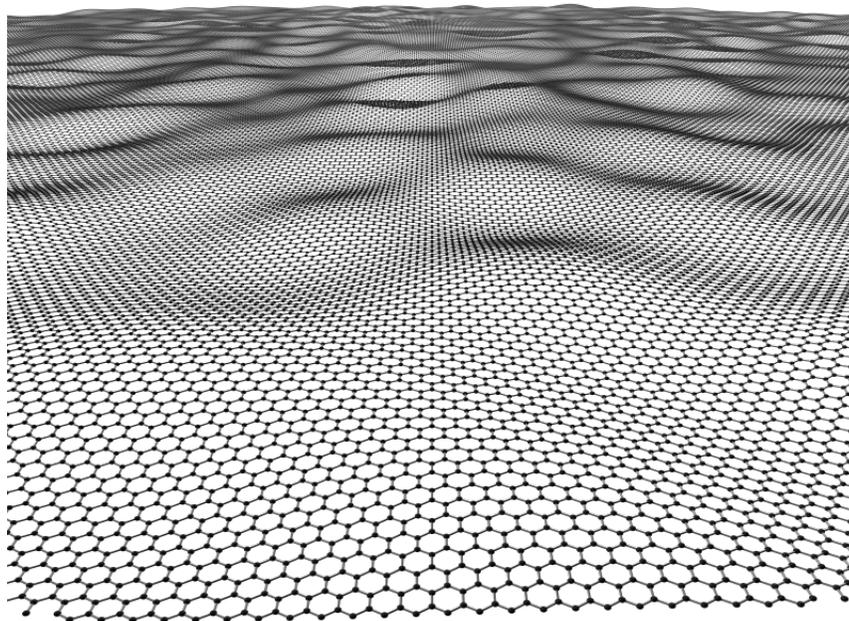


Figura 1.1: Ondulaciones en grafeno. Representación artística, créditos Jan-nik Meyer

El grafeno destaca por sus extraordinarias propiedades eléctricas, térmicas y ópticas; razones por las cuales se espera que tenga importantes aplicaciones prácticas. Se caracteriza por su excelente conductividad, que es incluso miles de veces mayor que la conductividad del cobre [10], aunque su valor es muy sensible al tipo de sustrato en el que se encuentre. La mayor movilidad de sus portadores de carga se alcanza cuando está suspendido en aire [11]. Cifras conservadoras para la movilidad de los portadores de carga del grafeno exfoliado sugieren valores de  $200,000 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$  [12, 13, 14], sin embargo se han reportado valores de hasta  $1,000,000 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$  [15]. Cerca del punto de

Dirac la concentración de los portadores de carga del grafeno tiende a cero y los portadores pueden transportarse de manera balística (sufriendo muy poca dispersión)[7, 14, 16], un hecho muy interesante observado experimentalmente es que si además consideramos el límite de temperatura cero, se observa experimentalmente la existencia de una conductividad mínima finita del orden de  $(e^2/h)$  [17].

El grafeno destaca también por su elasticidad y resistencia mecánica. Es mucho más resistente que el acero, ya que se ha medido una resistencia a la ruptura de aproximadamente  $40\text{ N/m}$  y su módulo de Young es aproximadamente de  $1\text{TPa}$  [12]. Por otro lado es sumamente maleable, debido a su estructura mono-capa puede doblarse y desdoblarse fácilmente. El arreglo hexagonal en el grafeno lo hace muy denso, lo cual le otorga otra interesante propiedad: es impermeable a una gran cantidad de gases [18]. Sin embargo, recientemente se encontró que el grafeno permite el flujo de protones a través del mismo [19], propiedad que podría resultar muy importante, ya que a futuro se podrían utilizar membranas de grafeno para tamizar el hidrogeno de la atmósfera con la finalidad de generar electricidad.

Respecto a la conductividad térmica para grafeno suspendido, a temperatura ambiente puede alcanzar valores del orden de  $5000\text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  [20]. Dicha conductividad se debe al transporte de fonones balísticos [21], de ahí que la conductividad disminuya al colocar al grafeno en un substrato pues se incrementa considerablemente el número de canales de dispersión. Por ejemplo la conductividad térmica del grafeno en un substrato de dióxido de silicio alcanza un valor de  $600\text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  [20].

En relación a las propiedades ópticas del grafeno notamos primero que el grafeno es un material muy transparente. Una mono-capa absorbe solo el 2.3% de la luz incidente [22], mientras que el resto de la radiación es transmitida. Aunque tiene un rango amplio de absorción en el espectro visible, su pico de absorción se encuentra en el ultravioleta [23]. Cuando el grafeno es sometido a pulsos de un láser infrarrojo de picosegundos se observa luminiscencia blanca debido a que el láser crea un plasma de electrones y huecos que se recombinan en un espectro amplio de energías [24]. Debido a estas características (transparencia y delgadez) el grafeno podría ser útil en pantallas flexibles [20, 25, 26].

Uno de los aspectos más interesantes desde el punto de vista teórico del grafeno es que las excitaciones de baja energía para los portadores de carga se describen por una ecuación relativista de Dirac. Tal y como se mencionó anteriormente al estudiar la estructura de bandas del grafeno en el modelo de

acoplamiento fuerte, se obtiene que a bajas energías la relación de dispersión resulta ser lineal, lo cual es consistente con la dinámica de una partícula de masa nula. Esta relación de dispersión lineal, válida en el régimen de bajas energías, es similar a la que se presenta en la electrodinámica cuántica (QED) en el caso de fermiones sin masa, excepto que los portadores de carga en grafeno se mueven con una velocidad  $v_F$  que es del orden de  $v_F \sim 10^6 m/s$ , la cual es 300 veces menor que la velocidad de la luz en el vacío  $c$ .

El hecho de que la dinámica de los portadores de carga en grafeno se describan por una ecuación tipo Dirac, es una consecuencia de la estructura cristalina del grafeno. La red hexagonal consiste a su vez de dos subredes triangulares  $A$  y  $B$  (ver fig. 1.2 en la siguiente sección). Las bandas de valencia y conducción del grafeno son en general descritas por matrices de  $2 \times 2$  cuyas entradas se asocian a las subredes  $A$  y  $B$  respectivamente. Los grados de libertad asociados a las dos subredes se suelen identificar como dos componentes de iso-espín del problema [27]. Como veremos más adelante, una excitación electrónica en el grafeno a bajas energías está caracterizada por el momento lineal  $\mathbf{k}$  del fermión y por su helicidad o quiralidad ( $\sigma = \pm 1/2$ ), la cual se define como la proyección del operador de momento a lo largo de la dirección del isoespín (o pseudoespín). Esta quiralidad no se refiere al espín real del electrón, sino al pseudoespín asociado a las dos componentes de la función de onda, que como mencionamos están relacionadas con las subredes  $A$  y  $B$ . Por las razones anteriores el grafeno brinda un puente entre la física de materia condensada y la electrodinámica cuántica.

Al ser descrito por una ecuación de Dirac se espera que el grafeno presente varios fenómenos predichos por la electrodinámica cuántica (QED). Probablemente el ejemplo más claro es la paradoja de Klein; cuando una partícula cargada cuya energía es mayor al doble de su masa incide sobre una barrera de potencial, la partícula puede atravesar la barrera sin importar que tan ancha o alta sea y sin dar lugar a una componente reflejada. Este efecto predicho hace varias décadas por la electrodinámica cuántica no había podido ser observado en la física de partículas, porque debido al valor de la masa del electrón se requieren campos eléctricos enormes, mayores a los que se pueden producir en el laboratorio. Sin embargo en grafeno este efecto ocurre de manera constante debido precisamente a la masa nula de los portadores de carga, siendo en buena medida el origen de las altas conductividades observadas en el grafeno [28, 29].

El comportamiento inusual de los fermiones de Dirac en presencia de potenciales confinantes se relaciona con el fenómeno conocido como “Zit-

terbewegung”, el cual produce oscilaciones rápidas de la corriente eléctrica debido a la interferencia entre las componentes de energía positiva y negativa (partícula y anti-partícula). Se ha propuesto que el Zitterbewegung es el origen físico de la conductividad eléctrica mínima observada en el grafeno [30].

En el punto de Dirac la concentración de portadores de carga del grafeno tiende a cero, por lo que se podría esperar que la conductividad se anulara; sin embargo se observa experimentalmente la existencia de una conductividad mínima finita como comentamos anteriormente. Parte de la explicación de esta conductividad mínima finita es la dificultad de localizar fermiones de masa nula; cerca de los puntos de Dirac el último electrón o hueco puede transportarse de manera balística (sufriendo muy poca dispersión), con lo cual contribuye al valor finito  $e^2/h$  de la conductividad independientemente del tamaño de la muestra de grafeno.

Otros fenómenos interesantes de tipo pseudorelativista, es decir originados en la descripción del grafeno por medio de la ecuación de Dirac, son la producción de pares o mecanismo de Schwinger [31] y el efecto cuántico de Hall anómalo. El mecanismo de Schwinger se refiere a la producción de pares de partículas y antipartículas a partir del vacío al aplicar un campo eléctrico intenso. Hace más de medio siglo Schwinger calculó la amplitud de probabilidad para la producción de pares electrón-positrón para el caso de un campo eléctrico  $E$  constante [32]. A pesar de su importancia dicho resultado no se ha comprobado experimentalmente, debido a que la amplitud de producción es significativa para campos eléctricos para los cuales la energía es mayor que  $2mc^2$ , donde  $m$  es la masa del electrón. Esta condición requeriría de campos eléctricos inmensos del orden de  $E \approx 10^{16} V/cm$ , valores que claramente no pueden ser alcanzados en los laboratorios. El hecho de que los portadores de carga efectivos tengan masa nula, nos permite preguntarnos acerca de las posibles manifestaciones del mecanismo de Schwinger en el grafeno y de la posibilidad de observar alguna manifestación experimental de dicho mecanismo. En el siguiente capítulo estudiaremos una forma sencilla de calcular la amplitud de producción de pares en grafeno y comentaremos acerca de sus posibles consecuencias fenomenológicas.

Finalmente nos referimos al efecto Hall cuántico anómalo o no convencional el cual ya ha sido observado experimentalmente en el grafeno [33, 34, 35]. Como es bien sabido los electrones confinados a moverse en un plano y sujetos a un campo magnético perpendicular describen órbitas circulares. En el ámbito cuántico dichas órbitas están cuantizadas y el espectro de energías

es discreto, dando lugar a los niveles de Landau los cuales tienen una gran degeneración ya que los centros de las órbitas pueden ocupar cualquier lugar del plano. En el caso no relativista la energía de los niveles de Landau está dada por la expresión  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$  donde la frecuencia de ciclotrón está dada por  $\omega_c = eB/m$  y  $n = 0, 1, 2, 3 \dots$ . Los elementos anteriores resultan esenciales para entender el efecto cuántico de Hall. Por ejemplo el efecto cuántico de Hall entero se relaciona con el llenado completo de cada uno de los niveles de Landau [33], dando lugar a la cuantización de la conductividad de Hall de acuerdo a la fórmula  $\sigma_{xy} = (e^2/h)n$ , donde  $n$  es el máximo nivel de Landau que se ocupa completamente y que se manifiesta por la aparición de mesetas en la conductividad transversal, que aparecen al variar la densidad de electrones, o la intensidad del campo magnético.

El efecto cuántico de Hall (QHE) en grafeno es probablemente la demostración más contundente acerca de la estructura pseudorelativista y del carácter no masivo de los portadores de carga del grafeno. Lo anterior debido a la verificación experimental de los fenómenos QHE entero [7, 36] y QHE fraccionario [33, 34]. En el caso relativista y para portadores de carga de masa nula el espectro de los niveles de Landau está dado por la fórmula

$$E_{n,\sigma} = \pm \sqrt{2|e|B\hbar v_F^2 (n + 1/2 + \sigma)}, \quad (1.1)$$

donde el número cuántico  $n$  toma nuevamente los valores  $n = 0, 1, 2, 3 \dots$ , pero ahora los niveles dependen también de la quiralidad de los portadores de carga  $\sigma = \pm 1/2$ . Además de una dependencia del espectro  $E_{n,\sigma} \propto \sqrt{B}$  con respecto al campo magnético, en lugar de la dependencia lineal.

La fórmula anterior tiene peculiaridades características de los fermiones relativistas que dan lugar a las novedades que se observan en el QHE del grafeno. Por un lado tenemos ahora niveles de energía positiva que son llenados por los electrones y niveles de energía negativa que se manifiestan con las excitaciones de los huecos. Además tenemos la existencia de un nivel de energía cero, que se resulta de tener  $n = 0$  y  $\sigma = -1/2$ . La existencia de este nivel de energía cero da lugar precisamente al QHE anómalo observado en el grafeno. En este caso al variar la densidad de electrones alrededor del punto de neutralidad o cono de Dirac, se observan mesetas correspondientes al llenado completo de los niveles de Landau correspondientes tanto a energías positivas como negativas. Como mencionamos dichas mesetas se relacionan con el llenado completo de un nivel de Landau determinado. Se puede demostrar que la degeneración del nivel de energía cero  $E = 0$  ( $n = 0, \sigma = -1/2$ )

acomoda sólo la mitad de estados posibles provenientes de la banda de conducción y la otra mitad de la banda de valencia. Esta peculiaridad da lugar a un corrimiento o anomalía en la cuantización de la conductividad de Hall para el grafeno. La secuencia de mesetas cuantizadas en  $\sigma_{xy}$  se desplaza por valor de  $1/2$  con respecto a la expresión usual que se observa para el efecto cuántico de Hall. El resultado toma la forma  $\sigma_{xy} = 4(e^2/h)(n + 1/2)$ , donde  $n$  nuevamente se refiere al índice de Landau y el factor 4 toma en cuenta la degeneración del espín y la asociada a los dos puntos equivalentes de Dirac. La comprobación experimental de este resultado muestra claramente que los portadores de carga en grafeno se comportan como fermiones de Dirac con masa nula.

## 1.1. El grafeno

El grafeno consiste en una mono-capa de átomos de carbono agrupados en una estructura conformada por celdas hexagonales cuyo patrón asemeja a un panal de abejas. La red hexagonal del grafeno no es una red de Bravais sin embargo esta estructura puede verse como la superposición de dos subredes triangulares idénticas que sí son redes de Bravais. En la siguiente figura (fig. 1.2) se observa un esquema de la superposición de las dos redes triangulares.

Las propiedades singulares tanto electrónicas como mecánicas del grafeno provienen del arreglo entre los átomos de carbono.

El carbono en su estado base, tiene cuatro electrones de valencia; dos en la subcapa  $2s$  y dos en la subcapa  $2p$ . Cuando forma enlaces con otros átomos de carbono la hibridación  $sp^2$  entre un orbital  $s$  y dos orbitales  $p$  da lugar a una estructura triangular plana con la formación de un enlace  $\sigma$  entre átomos de carbono que están separados por una distancia de  $1.42 \text{ \AA}$ . La banda  $\sigma$  es la responsable de la estabilidad de la estructura de las redes que se forman en las diferentes formas alotrópicas del carbono.

Debido al principio de exclusión de Pauli estas bandas tienen una capa llena y por tanto forman una banda de valencia profunda. El orbital sin afectar  $p$  el cual es perpendicular a la estructura plana, puede enlazar covalentemente con sus átomos de carbono vecinos dando como resultado la formación de una banda  $\pi$ . Como cada orbital  $p$  tiene un electrón extra, resulta que la banda  $\pi$  se llena a la mitad[1]. Estas bandas llenas a la mitad permiten que los electrones se muevan libremente, dando lugar al comportamiento metálico

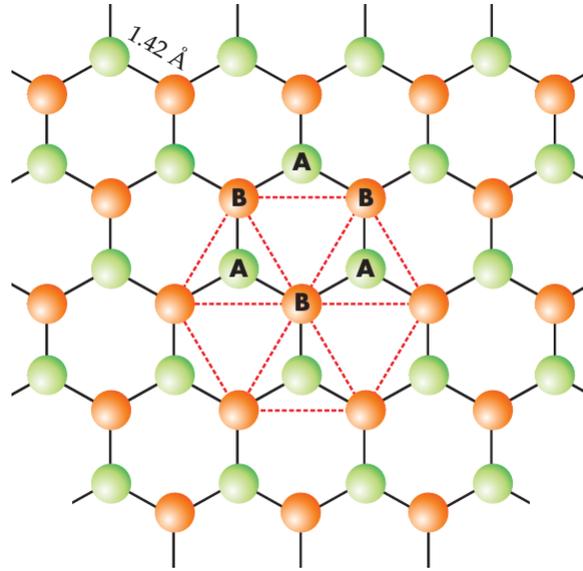


Figura 1.2: Estructura hexagonal del grafeno. Imagen tomada de ref.[27].

del sistema.

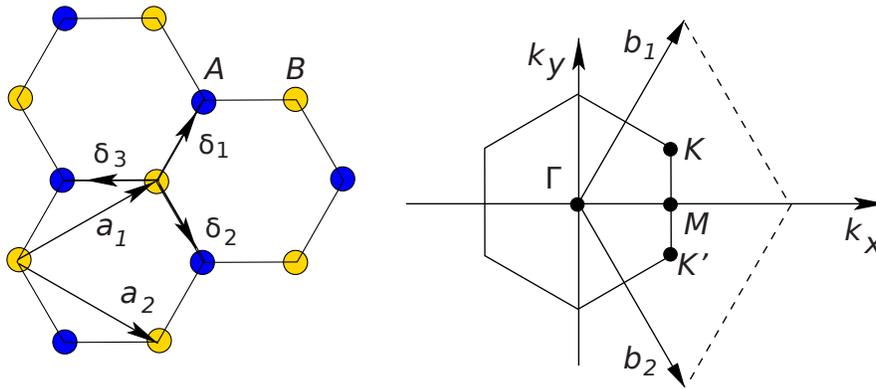


Figura 1.3: A la izquierda se muestran los vectores  $a_1$  y  $a_2$  que definen una red triangular en el grafeno, también se muestran los vectores  $\delta$ 's que localizan a los primeros vecinos. A la derecha se muestra la primera zona de Brillouin cuya forma es hexagonal así como los vectores  $\mathbf{b}_1$  y  $\mathbf{b}_2$  de la red recíproca, además de los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ . Imagen tomada de ref. [1]

En la figura (fig.1.3) se muestran algunas celdas del grafeno y se diferencian las dos redes triangulares con los colores amarillo y azul. La red completa tiene dos átomos por cada celda unitaria. Los vectores base de una de las redes triangulares se pueden elegir como

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, -1), \quad (1.2)$$

donde  $a \approx 1.42 \text{ \AA}$  es la distancia entre átomos contiguos de carbono dentro de la red triangular; notamos que los vectores base están normalizados  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_i = a^2$ . La red recíproca se puede generar por los vectores recíprocos que están dados por

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{\sqrt{3}}, 1 \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{\sqrt{3}}, -1 \right), \quad (1.3)$$

observamos que los vectores recíprocos cumplen con la condición:  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ .

Es necesario especificar en el espacio real los vectores que determinan la posición de los tres primeros vecinos y es importante notar que los tres primeros vecinos corresponden a átomos de la segunda red triangular. Estos vectores están dados por

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = -a(1, 0). \quad (1.4)$$

Para describir la dinámica de los portadores de carga en grafeno consideramos el formalismo en la aproximación de amarre fuerte. Para ello suponemos que en la vecindad de cada átomo de la red hexagonal el electrón de valencia está caracterizado por el orbital atómico  $p_z$  descrito por una función de onda  $|\phi_i^A\rangle$  o  $|\phi_j^B\rangle$ , dependiendo si el electrón se localiza en la posición  $\mathbf{R}_i^A$  de la red  $A$ , o  $\mathbf{R}_j^B$  de la red  $B$ .

El hamiltoniano de amarre fuerte a primeros vecinos para grafeno permite el salto de un electrón en un átomo localizado en el punto  $\mathbf{R}_i^A$  a sus vecinos más cercanos localizados en  $\mathbf{R}_j^B$ . Es decir un electrón de la subred  $A$  puede saltar a cualquiera de los tres átomos más cercanos, los cuales pertenecen a la red  $B$ . El hamiltoniano tiene la forma

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \{ |\phi_j^B\rangle \langle \phi_i^A| + |\phi_i^B\rangle \langle \phi_j^A| \}, \quad (1.5)$$

donde  $t \approx 2.8 \text{ eV}$  es la energía de salto a primeros vecinos. La suma se realiza sobre cada par de átomos vecinos  $i, j$ .

Considerando la subred  $A$ , la localización de los átomos de esta subred se puede especificar en términos del vector  $\mathbf{R}_i^A = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$ , donde  $i = (n, m)$  ( $n, m = 0, 1, 2, \dots$ ) etiqueta a los diferentes átomos de la subred  $A$ , ver fig. 1.3. Para localizar a los átomos de la red  $B$  podemos utilizar el conjunto de vectores  $\mathbf{R}_i^A$  desplazados por uno de los tres vectores  $\boldsymbol{\delta}_j$  que conectan con los primeros vecinos (1.4). Elegimos al vector  $\boldsymbol{\delta}_3$ , con lo cual los átomos de la red  $B$  se encuentran localizados en la posición  $\mathbf{R}_i^B = \mathbf{R}_i^A + \boldsymbol{\delta}_3$ . Hacemos notar que el sistema de coordenadas se eligió de tal manera que el origen coincide con un átomo de la red  $A$  y la orientación es tal que el ángulo relativo de los vectores  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$  respecto al eje  $x$  es el mismo. Esta selección es arbitraria, pero una vez que se ha hecho se debe utilizar de manera consistente en el análisis.

Con base en lo anterior observamos que en la representación de coordenadas la función de onda para el electrón localizado alrededor del punto  $\mathbf{R}_i^A$  de la red  $A$  está dada por  $\langle \mathbf{r} | \phi_i^A \rangle = \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i^A)$  y lo análogo para la red  $B$ . Para diagonalizar el hamiltoniano (1.5) se propone una combinación lineal de funciones de onda  $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i^{(A,B)})$  que satisface el teorema de Bloch. Una representación adecuada es la siguiente

$$\Psi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j [e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j^A} c_A(\mathbf{k}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^A) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j^B} c_B(\mathbf{k}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^B)], \quad (1.6)$$

donde  $N$  es el número de átomos en la celda unitaria. Los coeficientes  $c_{A,B}(\mathbf{k})$  se relacionan con la probabilidad de que el electrón se localice en la red  $A$  o  $B$  respectivamente. En efecto se cumple el teorema de Bloch, ya que para cualquier vector  $\mathbf{R}$  de la red se comprueba fácilmente que

$$\Psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \Psi_k(\mathbf{r}). \quad (1.7)$$

Los coeficientes  $c_{A,B}(\mathbf{k})$  se determinan por la condición de que  $|\Psi_k\rangle$  sea eigenfunción del hamiltoniano de amarre fuerte (1.5), es decir requerimos que cumpla la siguiente ecuación de valores propios

$$\mathcal{H}|\Psi_k\rangle = \epsilon(k)|\Psi_k\rangle. \quad (1.8)$$

Proyectamos la ecuación anterior sobre un estado  $\langle \phi_i^A |$ , de la proyección del lado derecho de la ecuación anterior se obtiene directamente el término

$$\epsilon(k) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^A} c_A(\mathbf{k}) / \sqrt{N}, \quad (1.9)$$

mientras que la proyección del lado izquierdo nos da la siguiente contribución

$$-t \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j(l)} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^B} c_B(\mathbf{k}), \quad (1.10)$$

donde la suma anterior se realiza sobre los tres valores de  $j$  correspondientes a los tres vecinos más cercanos al átomo localizado en  $\mathbf{R}_i^A$ ; los cuales corresponden a  $\mathbf{R}_j^B = \mathbf{R}_i^A + \boldsymbol{\delta}_1$ ,  $\mathbf{R}_j^B = \mathbf{R}_i^A + \boldsymbol{\delta}_2$  y  $\mathbf{R}_j^B = \mathbf{R}_i^A + \boldsymbol{\delta}_3$ . Tomando en cuenta lo anterior se obtiene

$$-t (e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_3}) c_B = \epsilon(\mathbf{k}) c_A. \quad (1.11)$$

De manera similar proyectando sobre  $\langle \phi_i^B |$  se obtiene

$$-t (e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_3}) c_A = \epsilon(\mathbf{k}) c_B. \quad (1.12)$$

Las dos ecuaciones anteriores corresponden a la siguiente ecuación efectiva de eigenvalores

$$\begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix}, \quad (1.13)$$

donde

$$f(\mathbf{k}) = -t (e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_3}). \quad (1.14)$$

La relación de dispersión se obtiene del siguiente determinante

$$\begin{vmatrix} -\epsilon & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & -\epsilon \end{vmatrix} = 0. \quad (1.15)$$

Con lo cual resulta que  $\epsilon(\mathbf{k}) = \pm |f(\mathbf{k})|$ . Utilizando las definiciones de los vectores  $\boldsymbol{\delta}_i$  en (1.4) se encuentra el espectro de energías

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3} k_y a) + 4 \cos\left(\frac{3}{2} k_x a\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y a\right)} \quad (1.16)$$

En la figura 1.4 se muestra la estructura de bandas del grafeno que se obtiene a partir de la relación de dispersión anterior. Observamos que es simétrica con respecto a la solución de energía cero:  $\epsilon(\mathbf{k}) = 0$ . El espectro está caracterizado por dos bandas: la banda superior o banda ( $\pi^*$ ) corresponde a las soluciones correspondientes al signo positivo en la relación de

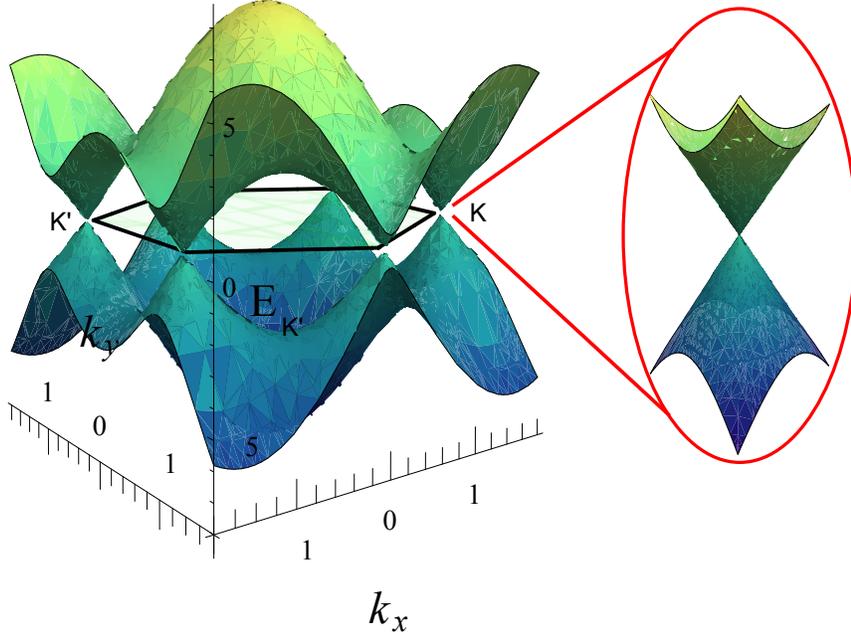


Figura 1.4: Relación de dispersión del grafeno. El hexágono representa la primera zona de Brillouin y tenemos también un acercamiento en uno de los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$

dispersión. Mientras que la banda inferior ( $\pi$ ) se obtiene considerando el signo negativo. La primera zona de Brillouin es un hexágono con lados de longitud  $4\pi/3\sqrt{3}a$ . Las dos bandas se tocan en los vértices de la primera zona de Brillouin. En efecto se puede verificar que  $\epsilon(\mathbf{k}) = 0$  para los siguientes seis valores de  $(k_x, k_y)$ :  $(\pm\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a})$ ,  $(\pm\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a})$  y  $(0, \pm\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a})$ . Sin embargo de estos seis puntos, sólo dos son independientes. Estos dos puntos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  se conocen como puntos de Dirac y su posición en el espacio de momentos está dada por

$$\mathbf{K} = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad \mathbf{K}' = \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right). \quad (1.17)$$

En la misma figura (fig. 1.4) se muestra un acercamiento de la estructura de bandas cerca de uno de los puntos de Dirac ( $\mathbf{K}$  o  $\mathbf{K}'$ ) en la frontera de la primera zona de Brillouin, se observa una forma cónica correspondiente

a una relación de dispersión lineal. La dinámica de los portadores de carga cerca de los puntos de Dirac se obtiene expandiendo la función  $f(\mathbf{k})$  (Eq. 1.14) cerca de los puntos  $\mathbf{K}$  (o  $\mathbf{K}'$ ). Consideremos primero el caso alrededor del punto  $\mathbf{K}$ , escribiendo  $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$  con  $|\mathbf{q}| < |\mathbf{K}|$  y expandiendo a primer orden en  $\mathbf{q}$  se obtiene

$$f(\mathbf{K} + \mathbf{q}) \approx iv_F e^{i\pi/3} (q_x + iq_y), \quad (1.18)$$

donde la velocidad de Fermi está dada por  $v_F = 3ta/2 \simeq 1 \times 10^6 m/s$  y se tomó en cuenta que  $\sum_{i=1}^3 e^{\pm i\mathbf{K} \cdot \delta_i} = 0$ . Utilizando el resultado de la ec. (1.18) y que el factor  $ie^{i\pi/3}$  es una fase que se puede reabsorber en la función de onda, encontramos que cerca del punto  $\mathbf{K}$  la función de onda de dos componentes

$$\psi = \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix}, \quad (1.19)$$

satisface la ecuación de Dirac bidimensional

$$v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q} \psi(\mathbf{q}) = E \psi(\mathbf{q}), \quad (1.20)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  son las matrices de Pauli. La solución de esta ecuación se obtiene de manera directa, los eigenvalores están dados por

$$E_{\pm\mathbf{K}}(\mathbf{q}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}|, \quad (1.21)$$

mientras que la función de onda en el espacio de momentos alrededor del punto  $\mathbf{K}$  se obtiene de los correspondientes eigenvectores de la Eq. (1.20)

$$\psi_{\pm\mathbf{K}}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_q/2} \\ \pm e^{i\theta_q/2} \end{pmatrix}, \quad (1.22)$$

donde los signos  $\pm$  corresponden a las soluciones de energía positiva y negativa respecto al punto  $\mathbf{K}$ , el cual corresponde al punto de neutralidad y  $\theta_q = \arctan(q_y/q_x)$ . Las dos componentes del espinor  $\psi_{\pm\mathbf{K}}$  representan la amplitud de la función de onda electrónica en los átomos de las dos subredes  $A$  y  $B$ . Claramente  $\psi_{\pm\mathbf{K}}$  tiene una estructura similar a los espinores de dos componentes utilizados para describir el espín. Sin embargo en el caso del grafeno la forma de  $\psi_{\pm\mathbf{K}}$  tiene su origen en la estructura hexagonal del grafeno, por lo cual es común referirse en este caso a un pseudoespín. Los estados de energía positiva en grafeno son identificados con portadores tipo electrón, por lo tanto de carga negativa. En cuanto a los estados de energía negativa, si la banda

de valencia no está llena, sus estados electrónicos desocupados (huecos) se comportan como cuasipartículas cargadas positivamente. Debido a la estructura de Dirac los huecos se comportan como positrones. En grafeno electrones y huecos están interconectados mutuamente, son antipartículas uno del otro. Este hecho permite predecir que en grafeno se debe poder definir la helicidad y adicionalmente la helicidad de los electrones debe ser opuesta a la de los huecos. Si bien en materia condensada el concepto de partículas y huecos son conceptos comunes, usualmente las ecuaciones que describen a dichas cuasipartículas no están relacionadas, por lo cual las propiedades de partículas y huecos no guardan relación entre si.

El que los portadores de carga cerca de los puntos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  sean descritos por una ecuación tipo Dirac de masa nula da lugar a varios aspectos muy interesantes característicos del grafeno. La relación de dispersión para la energía es una función lineal de momento, por lo que en grafeno los electrones se muevan a una velocidad constante  $v_F \approx c/300$ , independientemente del momento. Como resultado de esto los portadores de carga en grafeno tienen, en ciertos aspectos, un comportamiento relativista característico de partículas de masa nula. En particular tienen una quiralidad o helicidad definida. En efecto se puede definir el operador de helicidad como la proyección del momento a lo largo de la dirección de pseudoespín, es decir

$$\hat{h} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|}. \quad (1.23)$$

Se puede comprobar de manera inmediata que las funciones de onda en la ec. (1.22) son también eigenfunciones de  $\hat{h}$

$$\hat{h} \psi_{\pm \mathbf{K}}(\mathbf{q}) = \pm \frac{1}{2} \psi_{\pm \mathbf{K}}(\mathbf{q}). \quad (1.24)$$

Por lo tanto las soluciones de energía positiva o electrones tienen helicidad positiva, mientras que los huecos tienen helicidad negativa. En este sentido vemos que los portadores de carga cerca del punto de Dirac tiene una quiralidad o helicidad definida. La situación es similar al caso del los neutrinos, sabemos que los neutrinos son izquierdos correspondiendo a una proyección del espín en dirección opuesta a la del momento  $\mathbf{p}$ ; mientras que los anti-neutrinos son derechos, es decir con el espín apuntando en dirección paralela a  $\mathbf{p}$ .

Consideremos ahora el análisis cuando el desarrollo se realiza alrededor del punto  $\mathbf{K}'$ :  $\mathbf{k} = \mathbf{K}' + \mathbf{q}$ , en este caso se obtiene  $f(\mathbf{K}' + \mathbf{q}) \approx i v_F e^{i\pi/3} (q_x - i q_y)$

con lo cual el hamiltoniano efectivo para los portadores de carga alrededor del punto  $\mathbf{K}'$  está dado por

$$H_{\mathbf{K}'} = v_F \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{q} \quad (1.25)$$

Los eigenvalores de este hamiltoniano coinciden con los de la Ecuación (1.21), mientras que la ecuación de onda tiene la forma

$$\psi_{\pm\mathbf{K}'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta_q/2} \\ \pm e^{-i\theta_q/2} \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

La dinámica es por lo tanto nuevamente la de fermiones de Dirac de masa nula, pero con helicidad opuesta a la que se obtuvo alrededor del punto  $\mathbf{K}$ , en efecto alrededor del punto  $\mathbf{K}'$  se tiene

$$\hat{h}\psi_{\pm\mathbf{K}'}(\mathbf{q}) = \mp \frac{1}{2}\psi_{\pm\mathbf{K}'}(\mathbf{q}). \quad (1.27)$$

Las funciones de onda en los puntos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  están relacionadas por una simetría de reflexión temporal. Esto se puede mostrar si, en la fig. 1.3 que muestra la primera zona de Brillouin, el origen del sistema de coordenadas en el espacio de momento se coloca en el punto  $M$  que se encuentra equidistante a los puntos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ . En este caso la simetría de reflexión temporal es equivalente a la reflexión respecto al eje  $k_x$ , de acuerdo a  $(k_x, k_y) \rightarrow (k_x, -k_y)$ . Claramente bajo esta reflexión la función  $\psi_{\pm\mathbf{K}}$  (ec. 1.22) se transforma en  $\psi_{\pm\mathbf{K}'}$  (ec. 1.26). Otra propiedad importante de la función de onda (ecs. 1.22 y 1.26) se observa ante una rotación de  $2\pi$  del ángulo  $\theta_q$ , en cuyo caso la función de onda cambia de signo, lo cual corresponde a una fase de  $\pi$ . Esta fase se identifica con la fase de Berry. Un cambio de  $\pi$  en la fase de la función de onda producida por una rotación espacial de  $2\pi$  es una característica típica de los espinores.

## 1.2. Tunelaje de Klein

A continuación vamos a revisar el *tunelaje* de Klein analizando el coeficiente de transmisión para una barrera electrostática [28], cuya evidencia experimental se reporta en [37].

Como mencionamos en la introducción el estudio del grafeno presenta la posibilidad de analizar y observar algunos fenómenos característicos de la

física de altas energías. Uno de estos fenómenos es el de la paradoja o *tunelaje de Klein*. El tunelaje de Klein se refiere al comportamiento presentado por partículas relativistas que pueden penetrar a través de una barrera de potencial, cuando la altura del potencial  $V_0$  excede el doble de la energía del electrón en reposo ( $mc^2$ ). En este caso el coeficiente de transmisión  $T$  tiene una dependencia débil respecto a  $V_0$  y para incidencia normal la barrera se vuelve completamente transparente ( $T = 1$ ) [28, 29].

Esta situación es completamente diferente al caso de la mecánica cuántica no relativista, en el cual  $T$  presenta un decaimiento exponencial en la medida en que  $V_0$  se incrementa. El origen físico del *tunelaje de Klein* se puede entender si consideramos que aún cuando la barrera es repulsiva para los electrones, atrae a los positrones dando lugar a estados de energía permitidos para los positrones dentro de la barrera que se alinean con la energía del continuo de los electrones fuera de la barrera. Este apareamiento de las funciones de onda de electrones y positrones en la frontera da lugar al incremento de la probabilidad de *tunelaje* a través de la barrera.

En el caso de la electrodinámica cuántica la observación del *tunelaje* de Klein representa una enorme dificultad tecnológica y hasta ahora no ha sido observada experimentalmente. Su observación requeriría campos eléctricos que produjeran una caída de potencial del orden  $mc^2$  en una distancia equivalente a la longitud de Compton del electrón  $\hbar/mc$ , esto equivale a campos eléctricos enormes, del orden de  $\mathcal{E} > 10^{16} V/cm$ . Dichos campos eléctricos sólo podrían aparecer en situaciones extremas tales como la relacionada a la evaporación de un agujero negro por medio de la generación de pares electrón-positrón cerca del horizonte de eventos. Sin embargo en el caso del grafeno la dinámica de los portadores de carga es descrita por una ecuación de Dirac con masa nula, esto abre la posibilidad de observar experimentalmente el *tunelaje* de Klein. De hecho, en parte, la gran movilidad de los portadores de carga en el grafeno y la existencia de una conductividad mínima se originan en la dificultad de localizar fermiones de Dirac de masa nula.

### 1.2.1. Dispersión por una barrera electrostática

Con la finalidad de presentar de manera cuantitativa el fenómeno de *tunelaje* de Klein en grafeno, consideremos la dispersión de un fermión de masa nula descrito por la ecuación de Dirac bidimensional en presencia de una barrera de potencial cuadrada.

El problema de dispersión por una barrera rectangular en el caso relati-

vista, es similar a los problemas de barreras conocidos de mecánica cuántica no relativista. La solución se obtiene en cada una de las zonas en las que el potencial divide al espacio y se utiliza la condición de continuidad para emparejar las soluciones en las fronteras de la barrera. Se obtiene un conjunto de ecuaciones a partir de las cuales se puede determinar el coeficiente de transmisión [28]. Cabe resaltar que la ecuación de Dirac es de primer orden, por lo que no se necesita introducir la condición de continuidad en las primeras derivadas de la función de onda.

Consideremos la solución de la ecuación de eigenvalores  $\hat{H}\psi(x, y) = E\psi(x, y)$ , donde el hamiltoniano tiene la forma

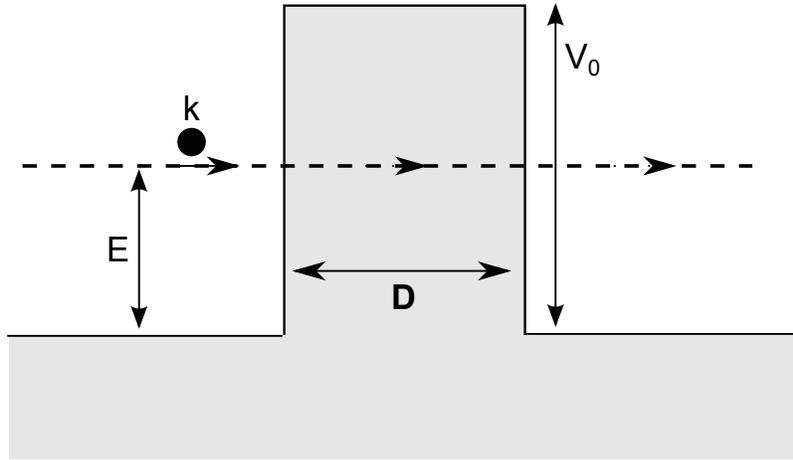


Figura 1.5: Barrera de potencial rectangular

$$\hat{H} = \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} + V(x) \mathbf{I}, \quad (1.28)$$

aquí  $\mathbf{I}$  es la matriz unidad de  $2 \times 2$  y la barrera cuadrada de potencial en la dirección  $x$  tiene la forma

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| < D/2 \\ 0 & |x| > D/2 \end{cases}. \quad (1.29)$$

Tomando en cuenta que el potencial es independiente de la coordenada  $y$ , tenemos que el momento  $k_y$  es una cantidad conservada y la función  $\psi(x, y)$  se puede expresar como un espinor de la siguiente forma

$$\psi(x, y) = e^{ik_y y} \begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

Podemos distinguir tres regiones: la región I para  $x < -D/2$ , donde el potencial se anula; la región II en la que  $-D/2 < x < D/2$  donde el potencial es  $V_0$ ; y la región III,  $D/2 < x$ , en la que nuevamente se anula el potencial. La solución de la ecuación de Dirac para una partícula de energía  $E$  en las tres regiones toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \psi_I(x, y) &= A \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} + A' \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(k_x x - k_y y)}, \\ \psi_{II}(x, y) &= B \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{i(q_x x + k_y y)} + B' \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-i(q_x x - k_y y)}, \\ \psi_{III}(x, y) &= C \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} + C' \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(k_x x - k_y y)}. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Para las soluciones en las regiones I y III se tiene que:  $s = \text{sgn}(E)$ ,  $k_x = \sqrt{\frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2}$  y  $\phi = \arctan(k_y/k_x)$ ; mientras que en la región II:  $s' = \text{sgn}(E - V_0)$ ,  $q_x = \sqrt{\frac{(E - V_0)^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2}$  y  $\theta = \arctan(k_y/q_x)$ . En el caso que nos interesa  $\phi$  representa el ángulo de incidencia (con respecto a la normal a la barrera de potencial) y  $\theta$  es el ángulo de refracción, la conservación de  $k_y$  nos permite relacionar estos ángulos dando lugar a la ley de Snell

$$E \sin \phi = -(E - V_0) \sin \theta. \quad (1.32)$$

Utilizando la condición de continuidad para los espinores en  $x = -D/2$  y  $x = D/2$ , se obtienen ecuaciones que permiten relacionar las amplitudes que aparecen en las ecs. (1.31). En particular eliminando las amplitudes  $B$  y  $B'$ , nos permite relacionar las amplitudes  $A$  y  $A'$  de la región I con las amplitudes  $C$  y  $C'$  de la región III por medio de la ecuación

$$\begin{pmatrix} A \\ A' \end{pmatrix} = \frac{1}{4 \cos \theta \cos \phi} \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ C' \end{pmatrix}, \quad (1.33)$$

donde los elementos de la matriz  $M$  están dados por

$$\begin{aligned}
M_{11} &= 4e^{ik_x D} [\cos \theta \cos \phi \cos(q_x D) + i \sin(q_x D) (\sin \theta \sin \phi - ss')] \quad (1.34) \\
M_{12} &= 2i \sin(q_x D) [ss'e^{-i2\phi} - ss' + 2i \sin \theta e^{-i\phi}], \\
M_{21} &= 2i \sin(q_x D) [-ss'e^{i2\phi} + ss' + 2i \sin \theta e^{i\phi}], \\
M_{22} &= 4e^{-ik_x D} [\cos \theta \cos \phi \cos(q_x D) - i \sin(q_x D) (\sin \theta \sin \phi - ss')].
\end{aligned}$$

Consideramos un electrón incidente desde la región I correspondiente a una onda que se propaga con un ángulo  $\phi$  respecto al eje  $x$ , en este caso  $E > 0$  ( $s = 1$ ) y como no hay partículas que incidan desde el lado derecho de la barrera, tenemos que  $C' = 0$ , esto implica que  $A = \frac{M_{11}}{4 \cos \theta \cos \phi} C$ , de aquí obtenemos el coeficiente de transmisión [28]

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = [1 + \sin^2(q_x D) [(\tan \theta \tan \phi - s' \sec \theta \sec \phi)^2 - 1]]^{-1}. \quad (1.35)$$

La expresión anterior (1.35), puede ser representada gráficamente en función del ángulo de incidencia para una energía dada. Como nos interesa principalmente ejemplificar el tunelaje característico del grafeno, consideramos el caso  $E < V_0$  ( $s' = -1$ ). Para generar gráficas observamos que las ecuaciones (1.32) y (1.35) se pueden expresar en términos de dos parámetros, la energía adimensional  $\epsilon = E/V_0$  y el ancho adimensional de la barrera  $\delta = V_0 D / 2\pi \hbar v_F$ . Estos parámetros se estiman considerando valores típicos del grafeno: el momento se identifica con el momento de Fermi  $k \equiv k_F = \sqrt{\pi n_e}$ , donde para la densidad de electrones consideramos  $n_e = 0.46 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Para el ancho y la altura de la barrera suponemos  $D = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 180 \text{ meV}$  respectivamente. Con estos valores obtenemos  $\epsilon = 0.48$  y  $\delta = 4$ .

La fig. 1.6 muestra la dependencia angular del coeficiente de transmisión como función del ángulo de incidencia para dos combinaciones de los parámetros  $\epsilon = 0.48$  y  $\delta = 4$  y  $\epsilon = 0.29$  y  $\delta = 6.91$ . Es interesante considerar el límite de barreras muy altas  $V_0 \gg E$ , en cuyo caso el coeficiente de transmisión se reduce a la siguiente expresión

$$T = \frac{\cos^2 \phi}{1 - \cos^2(q_x D) \sin^2 \phi}. \quad (1.36)$$

De las ecuaciones (1.35) y (1.36) observamos que para el caso de incidencia normal,  $\phi = 0$ , la barrera es completamente transparente, es decir el

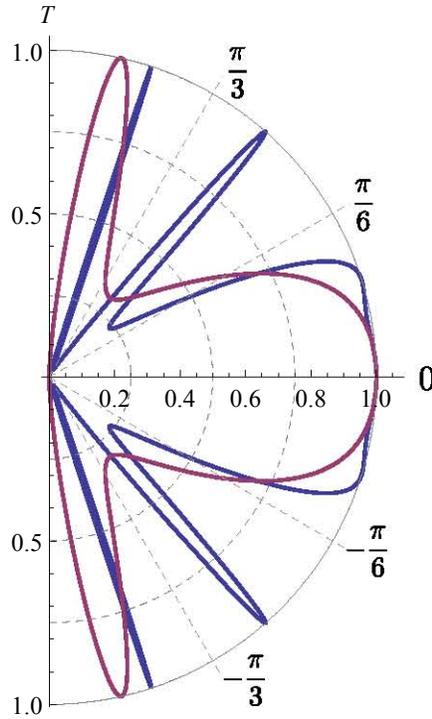


Figura 1.6: Gráfica polar para el coeficiente de transmisión  $T$  en función del ángulo de incidencia  $\phi$ . En cada gráfica se mantienen constantes los parámetros  $\epsilon = E/V_0$  y  $\delta = V_0 D/2\pi\hbar v_F$ . Las dos gráficas se obtienen para la siguiente selección de los parámetros:  $\epsilon = 0.48$ ,  $\delta = 4$  (línea azul) y  $\epsilon = 0.29$ ,  $\delta = 6.91$  (línea roja).

coeficiente de transmisión es exactamente igual a 1, independientemente del ancho y de la altura de la barrera. Esta notable propiedad corresponde al efecto conocido como tunelaje de Klein y es característica de los fermiones de masa nula.

El efecto de tunelaje perfecto se puede explicar en términos de la conservación de la quiralidad o pseudoespín en grafeno. Tal y como comentamos en la introducción los portadores de carga en grafeno tienen una quiralidad o helicidad bien definida; los electrones (solución de energía positiva) tienen helicidad positiva. Por lo tanto para que en el caso de incidencia normal, la barrera refleje parte del flujo incidente de electrones se requiere un cambio en el momento  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ , pero como los electrones tienen helicidad positiva,

se requiere que simultáneamente el pseudoespín se revierta  $\sigma \rightarrow -\sigma$ . Sin embargo esta inversión del pseudoespín no puede ser producida por el potencial, ya que al ser proporcional a la unidad en el espacio de isoespín, no puede invertir la dirección de  $\sigma$ . Este hecho tiene importantes consecuencias en las propiedades de transporte en el grafeno, ya que se relaciona con la gran movilidad que presentan los portadores de carga y la imposibilidad de confinarlos por medio de potenciales electrostáticos.

En la fig. 1.6 observamos que, además del ángulo  $\phi = 0$ , existen otros ángulos de incidencia para los cuales la barrera se vuelve transparente ( $T = 1$ ), de las ecuaciones (1.35) y (1.36) es claro que esto se produce cuando se cumple la siguiente condición de resonancia  $q_x D = n\pi$ , con  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . En este caso el efecto se obtiene como resultado de efectos de interferencia. La condición anterior refleja que un número semientero ( $n/2$ ) de longitudes de onda ( $2\pi/q_x$ ) caben exactamente en el ancho ( $D$ ) de la región de potencial. La situación es análoga a un interferómetro de Fabry-Perot en el cual el equivalente a la cavidad delimitada entre los dos espejos reflectores es la región de la barrera de potencial.

En la fig. 1.7 se muestra un diagrama de contorno para el coeficiente de transmisión  $T$ , como función del ángulo de incidencia  $\phi$  y del ancho adimensional de la barrera de potencial  $\delta = V_0 D / 2\pi \hbar v_F$ , para un valor fijo de la energía adimensional  $\epsilon = 0.48$ . La figura muestra claramente que cerca de la región de incidencia normal  $\phi = 0$ , la barrera es completamente transparente ( $T = 1$ ) independientemente del ancho de la barrera. Para otros valores del ángulo de incidencia  $\phi$ , se observan claramente las resonancias que producen tunelaje ( $T = 1$ ) cuando se cumple la condición de resonancia  $q_x D = n\pi$ .

### 1.3. Contenido

En esta tesis nos interesa estudiar la dinámica de los portadores de carga del grafeno en interacción con campos electromagnéticos. En particular queremos analizar diversos fenómenos análogos a los predichos por la electrodinámica cuántica, los cuales aparecen debido a que los portadores de carga del grafeno a bajas energías se describen por la ecuación de Dirac. Nos referimos a estos como efectos pseudorelativistas del grafeno.

En el capítulo 2 presentaremos el formalismo general para describir la interacción del grafeno con campos electromagnéticos dependientes del tiempo, pero que son espacialmente homogéneos. Describiremos los elementos esen-

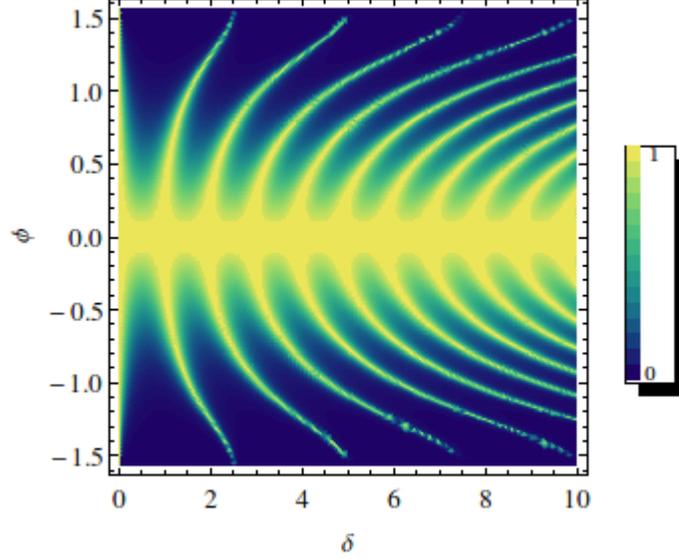


Figura 1.7: Diagrama de contorno para el coeficiente de transmisión  $T$ , como función del ángulo de incidencia  $\phi$  y del ancho adimensional de la barrera de potencial  $\delta = V_0 D / 2\pi \hbar v_F$ , para un valor fijo de la energía adimensional  $\epsilon = 0.48$ . La figura muestra claramente que cerca de la región de incidencia normal  $\phi = 0$ , la barrera es completamente transparente ( $T = 1$ ) independientemente del ancho de la barrera. Para otros valores del ángulo de incidencia  $\phi$ , se observan claramente las resonancias que producen tunelaje ( $T = 1$ ) cuando se cumple la condición de resonancia  $q_x D = n\pi$ .

ciales de los formalismos de Magnus y de Magnus-Floquet que utilizaremos para analizar dichos sistemas. Veremos que en el caso de interacción con un campo eléctrico constante se presenta un fenómeno análogo al mecanismo de Schwinger, relacionado con la creación de pares electrón-hueco. Revisaremos su relación con la conductividad mínima observada en el grafeno, así como los efectos no-lineales en la corriente eléctrica inducida.

En el capítulo 3 estudiaremos la interacción del grafeno con una onda electromagnética, en los casos de polarización lineal y circular. Analizaremos el espectro de cuasienergías del sistema, en particular la posible generación de brechas en dicho espectro. Se revisarán también los efectos no-lineales en la corriente inducida, en particular los relacionados con la generación de

radiación que contiene armónicos de orden superior. Posteriormente, en el capítulo 4 se ampliará el estudio al caso de la interacción del grafeno con un campo electromagnético cuantizado.

En el capítulo 5 analizaremos la interacción de los portadores de carga del grafeno con campos magnéticos. Analizaremos los posibles efectos de confinamiento por medio de barreras magnéticas. Finalmente en el capítulo 6 presentaremos las conclusiones de este trabajo.

## Capítulo 2

# Grafeno en interacción con un campo eléctrico constante: producción de pares electrón-hueco

En este capítulo y el próximo consideraremos la dinámica de los portadores de carga del grafeno en presencia de campos electromagnéticos dependientes del tiempo, pero espacialmente homogéneos sobre la superficie del grafeno. En las dos siguientes secciones analizaremos el formalismo general basado en la ecuación bidimensional de Dirac, así como el cálculo de la corriente eléctrica. Posteriormente estudiaremos el caso de un campo eléctrico constante. Si bien este problema admite una solución exacta, es útil considerar algunos métodos de solución aproximada, tales como el de la aproximación de Magnus. Lo anterior se debe a que ayuda a entender elementos físicos del problema y analizar fenómenos de interés, tales como el de la producción de pares electrón-hueco y el de la conductividad mínima del grafeno. Adicionalmente extenderemos estas técnicas en el siguiente capítulo para analizar la respuesta del grafeno cuando es irradiado por ondas electromagnéticas con polarización lineal y circular.

## 2.1. Mecanismo de Schwinger

El mecanismo de Schwinger se refiere a la producción de pares electrón-positrón a partir del vacío al aplicar un campo eléctrico constante. Lo cual se puede interpretar como un rompimiento dieléctrico del vacío (*dielectric breakdown*) producido por el campo eléctrico. En 1951 J. Schwinger [32] calculó explícitamente la probabilidad de persistencia del vacío al aplicar un campo eléctrico constante. Suponiendo que al tiempo inicial  $t = 0$ , el estado corresponde al vacío  $|vac\rangle$  y que el operador de evolución del sistema al tiempo  $t$  está representado por  $U(t)$ , Schwinger encontró que la probabilidad  $P(t)$  de que al tiempo  $t$  el sistema se mantuviera en el vacío está dado por

$$P(t) = |\langle vac|U(t)|vac\rangle|^2 = \exp(-w V t), \quad (2.1)$$

donde  $V$  es el volumen del sistema y  $w$  es la rapidez de decaimiento del vacío por unidad de volumen

$$w = \frac{(eE)^2}{4\pi^3\hbar^2c} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp\left(-\frac{n\pi m^2 c^3}{eE\hbar}\right), \quad (2.2)$$

en esta fórmula  $c$  es la velocidad de la luz,  $e$  y  $m$  se refieren a la carga y masa del electrón respectivamente y  $E$  es la intensidad del campo eléctrico.

Aunque en la literatura frecuentemente se identifica  $w$  con la tasa de producción de pares por unidad de volumen; análisis más recientes han mostrado que si bien las ecs. (2.1,2.2) son correctas, la interpretación anterior no lo es. Cálculos detallados, en los que se identifican de manera correcta los estados asintóticos iniciales y finales, muestran que la rapidez de producción de pares por unidad de volumen está dada por [38],[39]

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{(eE)^2}{4\pi^3\hbar^2c} \exp\left(-\frac{\pi m^2 c^3}{eE\hbar}\right). \quad (2.3)$$

Es decir la tasa de producción de pares por unidad de volumen se obtiene solamente del primer término de la serie en la ec.(2.2). En la ecuación anterior  $n(t)$  se refiere al número de pares electrón-positrón creados al tiempo  $t$  por efecto del campo eléctrico.

El mecanismo de Schwinger fue importante para entender lo que en un principio se denominó como “paradoja de Klein”, pues resultaba paradójico que una partícula cargada pudiera atravesar libremente una barrera repulsiva. Sin embargo de acuerdo al mecanismo de Schwinger cuando el campo

eléctrico es suficientemente intenso, se producen dentro de la barrera pares electrón-positrón, lo cual explica que de manera efectiva los electrones puedan atravesar la barrera sin ser dispersados, y en este caso nos referimos al fenómeno como dispersión de Klein.

En el caso del grafeno los portadores de carga se mueven en un sistema bidimensional, pero de manera similar a la electrodinámica cuántica (QED) tenemos una simetría de carga-helicidad entre las excitaciones que representan a los electrones y a los huecos. Con base en esta idea Allor *et al.* [40] consideraron el cálculo del mecanismo de Schwinger para un sistema bidimensional, obteniendo el siguiente resultado para la tasa de producción de pares por unidad de área

$$\begin{aligned}\frac{dn(t)}{dt} &= \frac{g(eE)^{3/2}}{4\pi^2\hbar^{3/2}c^{1/2}} \exp\left(-\frac{\pi m^2 c^3}{eE\hbar}\right), \\ \frac{dn(t)}{dt} &= \frac{g(eE)^{3/2}}{4\pi^2\hbar^{3/2}v_F^{1/2}},\end{aligned}\tag{2.4}$$

donde  $g = 4$  corresponde a la degeneración de espín y de valle. En el segundo renglón se tomó en cuenta que en el grafeno la masa de los portadores de carga se anula y su velocidad de propagación es  $v_F$ .

La posible observación del fenómeno de creación de pares electrón-positrón requiere que el argumento de la exponencial en la ec.(2.3) sea del orden de la unidad, lo cual implica valores críticos extremadamente grandes para el campo eléctrico  $E_c = m_e c^2/e \sim 10^{16} V/m$ . Esta intensidad de campos eléctricos es actualmente imposible de lograr en el laboratorio, lo cual ha hecho imposible la comprobación experimental del mecanismo de Schwinger en la QED.

Sin embargo en el caso análogo del grafeno el factor exponencial desaparece debido a que la masa de los portadores de carga se cancela, segunda fórmula de la ec.(2.4). Por lo tanto es de esperarse que el mecanismo de Schwinger pudiera tener implicaciones experimentales. En el contexto de la ecuación de Dirac, la producción de pares electrón-hueco se identifica con la transición de un estado de frecuencia negativa a uno de energía positiva, es decir de un fenómeno de tunelaje. En ese sentido varios autores han estudiado posibles manifestaciones del mecanismo de Schwinger en grafeno, utilizando la fórmula de tunelaje de Landau-Zener [31, 41]. En las siguientes secciones seguiremos un procedimiento similar, sin embargo nuestro estudio estará basado en el formalismo de Magnus, el cual permite obtener expresiones aproximadas que preservan la unitariedad de la solución. Las soluciones

obtenidas no se refieren solamente a soluciones asintóticas, como las de las ecs. (2.3) y (2.4), sino que nos permitirán obtener la evolución temporal, considerando la situación en la que el campo eléctrico se enciende a un tiempo finito determinado. Adicionalmente podemos estudiar la evolución temporal de la corriente eléctrica asociada a la creación de pares.

## 2.2. Grafeno en presencia de campos electromagnéticos dependientes del tiempo

### 2.2.1. Formalismo general

Consideremos el grafeno en interacción con un campo electromagnético espacialmente homogéneo y dependiente del tiempo:  $\mathbf{E}(t)$ . La interacción se introduce a través del potencial vectorial  $\mathbf{A}(t) = -\int^t \mathbf{E}(t') dt'$ , utilizando el principio de acoplamiento mínimo  $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \mathbf{\Pi} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}$  en el hamiltoniano de Dirac. Con esto obtenemos que el hamiltoniano efectivo está dado como

$$\hat{H} = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi}, \quad \mathbf{\Pi} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(t), \quad (2.5)$$

donde  $v_F \approx 10^6 m/s$  es la velocidad de Fermi,  $\boldsymbol{\sigma}$  es el vector formado por las componentes  $x$  e  $y$  de las matrices de Pauli,  $e$  es la carga del electrón; el operador de momento  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar(\partial_x, \partial_y)$  y el potencial vectorial  $\mathbf{A}(t) = (A_x(t), A_y(t))$ , incluyen solamente las componentes paralelas al plano del grafeno.

Tomando en cuenta la invariancia traslacional del problema podemos escribir la función de onda como  $\Psi(x, y, t) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\Psi(t)$ , con lo cual tenemos que la evolución temporal del sistema está descrita por la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = H(t)\Psi(t), \quad H = \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}), \quad (2.6)$$

donde  $\mathbf{p} = \hbar(k_x, k_y)$ . La ecuación anterior es ahora una ecuación diferencial de una sola variable: el tiempo. La ec.(2.6) tiene una estructura similar a la que aparece en el estudio de sistemas cuánticos de dos niveles. En particular la dinámica del sistema y la probabilidad de transiciones entre niveles se pueden entender en términos del formalismo de Landau-Zener [31, 42]. En lo que sigue utilizaremos dicha relación para analizar la dinámica del sistema. Para ello vamos a utilizar el formalismo de Magnus, el cual explicaremos más adelante.

Como primer paso es conveniente aplicar una transformación unitaria que diagonalice el hamiltoniano que aparece en la ec.(2.6). La transformación a la base  $\Psi'(t) = S^\dagger \Psi(t)$  se genera por la matriz [31]

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} & e^{-i\varphi/2} \\ e^{i\varphi/2} & -e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

con la cual se pueden comprobar los siguientes resultados de aplicar dicha transformación:

$$\begin{aligned} S^\dagger \sigma_x S &= \cos \varphi \sigma_z + \sin \varphi \sigma_y, & S^\dagger \frac{\partial}{\partial t} S &= -i \frac{\dot{\varphi}}{2} \sigma_x \\ S^\dagger \sigma_y S &= \sin \varphi \sigma_z - \cos \varphi \sigma_y, \end{aligned} \quad (2.8)$$

donde  $\dot{\varphi} = \partial_t \varphi$ . Seleccionando el ángulo  $\varphi$  de acuerdo a

$$\varphi = \text{Arctan} \left( \frac{p_y - eA_y(t)}{p_x - eA_x(t)} \right) \quad (2.9)$$

encontramos que en efecto se diagonaliza el hamiltoniano  $S^\dagger H S = \epsilon_p(t) \sigma_z$ , donde la energía instantánea  $\epsilon_p(t)$  está dada por la siguiente expresión

$$\epsilon_p(t) = v_F \sqrt{(p_x - eA_x(t))^2 + (p_y - eA_y(t))^2}. \quad (2.10)$$

Los dos eigenvalores instantáneos del hamiltoniano son  $\epsilon_p^\pm(t) = \pm \epsilon_p(t)$ . Con lo que tenemos que la función de onda  $\Psi'(t)$  evoluciona de acuerdo a

$$i\hbar \partial_t \Psi'(t) = \left[ \epsilon_p(t) \sigma_z - \frac{\hbar}{2} \dot{\varphi} \sigma_x \right] \Psi'(t). \quad (2.11)$$

$\dot{\varphi} \equiv \partial_t \varphi$  se calcula explícitamente como

$$\dot{\varphi} = ev_F^2 \frac{(p_y - eA_y) \dot{A}_x - (p_x - eA_x) \dot{A}_y}{\epsilon_p^2(t)} = ev_F^2 \frac{\hat{z} \cdot [(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \times \mathbf{E}]}{\epsilon_p^2(t)}, \quad (2.12)$$

donde  $\hat{z}$  es un vector unitario en la dirección perpendicular al plano del grafeno.

En ausencia de campo eléctrico externo, de las ecs. (2.10,2.11) se recupera la relación de dispersión del grafeno libre, caracterizada por el cono de Dirac, con vértice en  $\mathbf{p} = 0$ . En presencia del campo eléctrico, los eigenvalores

instantáneos de la energía  $\epsilon_p^\pm(t) = \pm\epsilon_p(t)$ , ec.(2.10), representan un cono de Dirac con un vértice móvil cuya posición central se localiza en el punto  $\mathbf{p} = e\mathbf{A}(t)$ .

Los niveles  $\epsilon_p^\pm(t)$  representan los eigenvalores de la energía en la base adiabática. En el límite adiabático  $\hbar\dot{\varphi} \ll \epsilon(t)$ , los dos estados evolucionan de manera independiente. Es decir, si el sistema se encuentra inicialmente en el estado de energía  $\epsilon_p^-(t) = -\epsilon_p(t)$ , al evolucionar el sistema, se mantendrá en este nivel de energía. Sin embargo, suponiendo que exista una región no-adiabática, se produce una transición del tipo Landau-Zener entre los dos estados. De hecho encontraremos que en el caso de un campo eléctrico constante los niveles de energía  $\epsilon_p^+(t)$  y  $\epsilon_p^-(t)$  tienen un tiempo único de máximo acercamiento, que nos permite calcular la probabilidad de transición utilizando el formalismo de Magnus. Por otro lado en el caso de una onda electromagnética con polarización lineal, los puntos de máximo acercamiento se repiten periódicamente, lo cual produce una secuencia de transiciones. La fase entre las diferentes transiciones produce un efecto acumulado, produciendo efectos de interferencia destructivos y constructivos. Lo anterior produce una dependencia periódica en el comportamiento del sistema con respecto a varios parámetros, este fenómeno conocido como interferometría de Landau-Zener-Stueckelberg (LZS), se ilustrará en el caso del grafeno irradiado por una onda electromagnética linealmente polarizada.

En algunos casos conviene aplicar una nueva transformación que elimine el término diagonal del hamiltoniano en la ec.(2.11). Esto se logra con la transformación a la base  $\Psi''(t) = Q^\dagger \Psi'(t)$ , donde

$$Q(t) = \exp[-i\alpha(t)\sigma_z] \quad \alpha(t) = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t \epsilon_p(t') dt'. \quad (2.13)$$

Aplicando esta transformación a la ec.(2.11), obtenemos que la ecuación de evolución para  $\Psi''(t)$  es la siguiente

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi''(t) = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \dot{\varphi}(t) e^{i2\alpha(t)} \\ \dot{\varphi}(t) e^{-i2\alpha(t)} & 0 \end{pmatrix} \Psi''(t). \quad (2.14)$$

Esta última representación nos resultará útil para evaluar las integrales que aparecen en el formalismo de Magnus, debido a que  $\dot{\varphi}(t)$  es resonante cerca del punto de Dirac móvil, lo cual permite evaluar adecuadamente los términos dominantes en la aproximación de Magnus.

## 2.2.2. Corriente eléctrica

Para el estudio de los portadores de carga del grafeno una de las observables más importantes es la corriente eléctrica. A continuación revisaremos los aspectos más importantes para este análisis basados en el formalismo de la sección anterior.

Para escribir la expresión de la corriente eléctrica para el grafeno, tomamos en cuenta que el operador de velocidad se obtiene a partir de la relación  $\hat{v}_l = i [\hat{H}, x_l] = v_F \sigma_l$  con  $l = x, y$ , donde el hamiltoniano  $\hat{H}$  está dado por la ec.(2.5). Con lo cual el operador de corriente para los portadores de carga viene dado por la siguiente expresión

$$\mathbf{j} = -ev_F \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.15)$$

Consideremos primero el valor esperado de la corriente para el estado  $\Psi(t)$ , solución de la ecuación de movimiento ec.(2.6). Escribiendo la función de onda en términos de sus componentes de pseudoespín  $\Psi(t) = (u(t), v(t))^T$ , calculamos el valor esperado de las componentes de la corriente para obtener

$$\begin{aligned} \langle j_x(t) \rangle &= -2ev_F \operatorname{Re} (u(t)^* v(t)) \\ \langle j_y(t) \rangle &= -2ev_F \operatorname{Im} (u(t)^* v(t)). \end{aligned} \quad (2.16)$$

En algunos de los casos específicos que estudiaremos posteriormente, nos convendrá trabajar con la solución  $\Psi'(t)$  ec.(2.11), que se obtiene al aplicar la transformación  $S(t)$  ec.(2.7). Los operadores de corriente en esta base están dados por las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} j'_x &= S^\dagger j_x S = -ev_F (\cos \varphi \sigma_z + \sin \varphi \sigma_y) \\ j'_y &= S^\dagger j_y S = -ev_F (\sin \varphi \sigma_z - \cos \varphi \sigma_y). \end{aligned} \quad (2.17)$$

En este caso los valores esperados se calculan utilizando la función de onda  $\Psi'(t) = (u'(t), v'(t))^T$ , solución de la ecuación de movimiento (2.11), con lo cual obtenemos

$$\begin{aligned} \langle j'_x(t) \rangle &= -ev_F [\cos \varphi (|u'|^2 - |v'|^2) + 2 \sin \varphi \operatorname{Re} (i u'^* v')] \\ \langle j'_y(t) \rangle &= -ev_F [\sin \varphi (|u'|^2 - |v'|^2) - 2 \cos \varphi \operatorname{Im} (i u'^* v')]. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Es interesante notar que de acuerdo a las ecs. (2.10,2.11),  $|u'|^2$  y  $|v'|^2$  representan la probabilidad de que los portadores de carga se encuentren en la

rama superior o inferior del cono de Dirac respectivamente. Es decir correspondan a electrones o a portadores de carga positiva (“positrones”). Debido a lo anterior a los primeros términos del lado derecho en la ec.(2.18) se les identifica como corrientes de conducción [31, 43]. Por otro lado el término que incluye  $Im(u'^*v')$  representa una interferencia entre los niveles de energía positiva y negativa, por lo tanto se identifica con el efecto llamado Zitterbewegung [28], y la corriente asociada se conoce como corriente de polarización [31, 43]. Es importante hacer notar que de acuerdo a la identificación que se hace en materia condensada,  $\epsilon_p^-$  es la banda de valencia y  $\epsilon_p^+$  la de conducción respectivamente. La corriente de conducción se asocia a las transiciones intrabanda, mientras que los efectos de Zitterbewegung se identifican con la transiciones interbanda.

Las componentes de la corriente se pueden expresar completamente en términos del número de ocupación del estado de energía positiva  $n_{\mathbf{p}}(t) = |u'(t)|^2$ . Para la contribución correspondiente a la corriente de conducción (intrabanda) utilizamos la condición de normalización  $|u'(t)|^2 + |v'(t)|^2 = 1$  para obtener

$$\langle j'_x(t) \rangle_{cond} = -ev_F \cos \varphi [2n_{\mathbf{p}}(t) - 1]. \quad (2.19)$$

Mientras que para la corriente de polarización (interbanda) utilizamos la primer componente de la ecuación de Dirac (2.11) para demostrar que

$$Re(i u'^*v') = \frac{2}{\dot{\varphi}(t)} Re\left(u'^* \frac{du'}{dt}\right) = \frac{2}{\dot{\varphi}(t)} \frac{dn_{\mathbf{p}}(t)}{dt}, \quad (2.20)$$

con lo cual encontramos que

$$\langle j'_x(t) \rangle_{pol} = -2ev_F \frac{\sin \varphi}{\dot{\varphi}(t)} \frac{dn_{\mathbf{p}}(t)}{dt}. \quad (2.21)$$

Las componentes en la dirección  $y$  de la corriente se pueden obtener de manera similar.

Hacemos notar que la corriente eléctrica en la base  $\Psi''(t) = (u''(t), v''(t))^T$ , solución de la ec.(2.14), tiene exactamente la misma forma que en las ecs. (2.19,2.21), debido a que  $n_{\mathbf{p}}(t) = |u'(t)|^2 = |u''(t)|^2$ .

### 2.2.3. Expansión de Magnus

La expansión de Magnus fue introducida en 1954 [44] como una herramienta sistemática para encontrar soluciones aproximadas de ecuaciones di-

ferenciales lineales matriciales del tipo

$$i \frac{\partial Y(t)}{\partial t} = M(t)Y(t), \quad (2.22)$$

donde  $M(t)$  es una matriz de dimensión  $n \times n$  e  $Y$  es un vector complejo de dimensión  $n$ . En el caso análogo de un sistema cuántico, identificamos a la matriz  $M$  con el hamiltoniano del sistema y al vector  $Y$  con su función de onda. Se introduce la matriz u operador de evolución  $U(t) \equiv U(t, t_0)$  con la propiedad

$$Y(t) = U(t)Y(t_0), \quad (2.23)$$

lo cual requiere que se cumplan la siguiente ecuación diferencial y condición inicial

$$i \frac{\partial U(t)}{\partial t} = M(t)U(t), \quad U(t_0) = \mathbf{1}, \quad (2.24)$$

donde  $\mathbf{1}$  es la matriz unidad. El formalismo de Magnus consiste en proponer una solución exponencial para el operador de evolución  $U(t)$ , [45], es decir

$$U(t) = \exp \Omega(t), \quad \Omega(t_0) = 0, \quad (2.25)$$

y la expansión de Magnus permite representar  $\Omega(t)$  como una serie

$$\Omega(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \Omega_n(t), \quad (2.26)$$

los términos de la serie se calculan recursivamente en términos de conmutadores de la matriz  $M(t)$ , evaluados a tiempos diferentes. Los primeros dos términos están dados por [45]

$$\Omega_1(t) = -i \int_{t_0}^t dt' M(t'), \quad (2.27)$$

$$\Omega_2(t) = -\frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' [M(t'), M(t'')]. \quad (2.28)$$

En el formalismo de Magnus, el operador de evolución se obtiene como la exponencial de una función matricial expresada como una serie. Los términos de esta serie se calculan a partir de integrales temporales de los conmutadores del hamiltoniano del sistema. El método ofrece una alternativa a la solución

de Dyson, donde el operador de evolución se expresa como productos ordenados de integrales temporales del hamiltoniano de interacción. La solución de Dyson sirve para el cálculo usual de la teoría de perturbaciones en problemas dependientes del tiempo en mecánica cuántica, y teoría cuántica de campos. En este sentido cada término del desarrollo de Magnus, contiene una suma parcial infinita de términos del desarrollo perturbativo usual de Dyson [45]. Una ventaja del método de Magnus, es que preserva la unitariedad del operador de evolución del sistema en cada orden de aproximación.

La expansión de Magnus ha sido utilizada para estudiar sistemas físicos en áreas diversas como física nuclear, atómica, molecular y óptica, entre otras. En el contexto de la teoría cuántica de campos se ha estudiado sistemáticamente su relación formal con la teoría de perturbaciones usual basada en el formalismo de Dyson. También ha sido utilizada para estudiar el problema de oscilaciones de neutrinos [46]. Una revisión detallada de las bases matemáticas de la expansión de Magnus, así como de sus aplicaciones en física se presenta en el artículo de revisión de Blanes *et al.* [45]. Una expresión cerrada para el  $n$ -ésimo término de la serie  $\Omega_n$ , fue encontrada por Mielnik y Plevanski [47].

#### 2.2.4. Expansión de Magnus-Floquet

En el caso en que el hamiltoniano del sistema es periódico se requiere aplicar la teoría de Floquet. Supongamos que el hamiltoniano  $M(t)$  en la ec.(2.22) es periódico, es decir  $M(t + \tau) = M(t)$ . El teorema de Floquet asegura que la solución a la ecuación de movimiento ec.(2.24) toma la siguiente forma [48, 49, 50]

$$U(t) = P(t)e^{tF}, \quad (2.29)$$

donde  $P$  y  $F$  son matrices de dimensión  $n \times n$ , tales que  $P(t)$  es periódica,  $P(t + \tau) = P(t)$ , y  $F$  es una matriz constante, cuyos eigenvalores representan las cuasienergías del sistema.

El formalismo de Magnus se puede adaptar para considerar sistemas periódicos. En el formalismo de Magnus-Floquet el operador  $P(t)$  se escribe como la exponencial de una función periódica  $\Lambda(t)$ , es decir

$$P(t) = \exp \Lambda(t), \quad \Lambda(t + \tau) = \Lambda(t). \quad (2.30)$$

En el formalismo de Magnus-Floquet, las dos matrices  $F$  y  $\Lambda(t)$  se expresan

como series de potencias

$$\Lambda(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \Lambda_n(t), \quad F = \sum_{n=1}^{\infty} F_n, \quad (2.31)$$

donde cada término de la expansión de  $\Lambda(t)$  es periódico. El resultado para la expansión de la matriz  $F$  toma una forma sencilla, ya que se demuestra que se obtiene a partir de las mismas expresiones que aparecen en las ecuaciones (2.27), pero integradas sobre un periodo, y dividido por  $\tau$ , es decir

$$F_n = \frac{\Omega_n(\tau)}{\tau}, \quad (2.32)$$

donde  $\Omega_n(\tau)$  se evalúa a partir de la ec. (2.27), con  $t_0 = 0$ .

La expansión para  $\Lambda(t)$  se expresa a partir de un conjunto de relaciones de recurrencia, los detalles se pueden consultar en el artículo de revisión de Blanes *et al.* [45]. En este trabajo sólo requerimos el primer término de la expansión, que toma la forma

$$\Lambda_1(t) = \int_0^t M(t) dt - t F_1. \quad (2.33)$$

Es claro que  $\Lambda_1(t)$  es una función periódica, de hecho  $\Lambda_1(\tau) = \Lambda_1(t_0) = 0$ .

### 2.3. Campo eléctrico constante

En esta sección consideramos en detalle el caso de un campo eléctrico constante. Si bien este problema tiene una solución exacta, utilizaremos un método aproximado para analizarlo; la expansión de Magnus. Esto nos permitirá entender elementos físicos importantes del problema, además de que nos servirá también para el análisis posterior que haremos del caso de grafeno irradiado por ondas electromagnéticas.

Suponemos como condiciones iniciales, que los estados de energía negativa se encuentran llenos y a partir del tiempo inicial  $t_0 = 0$  se aplica un campo eléctrico constante  $E_0$ . Nos interesa calcular la probabilidad de transición a los estados de energía positiva, lo cual se puede interpretar como un fenómeno análogo a la producción de pares vía el mecanismo de Schwinger, en este caso la producción de electrones y huecos. También consideraremos el cálculo de la corriente eléctrica producida por el campo eléctrico, así como de la

conductividad en el límite de campo eléctrico débil, la cual veremos que se relaciona con la conductividad mínima observada en el grafeno. Finalmente analizamos los efectos no-lineales y la dependencia temporal de la corriente en el caso de campos eléctricos intensos.

### 2.3.1. Producción de pares electrón-hueco

Consideramos que el campo eléctrico está alineado a lo largo del eje  $x$ , con lo cual tenemos:  $\mathbf{E} = \hat{x}E_0\theta(t)$ , donde  $\hat{x}$  es el vector unitario a lo largo del eje  $x$  y  $\theta(t)$  es la función escalón. El potencial vectorial está dado por  $\mathbf{A} = -\hat{x}E_0 t \theta(t)$ .

Es conveniente definir el siguiente conjunto de variables adimensionales

$$\kappa_x \equiv \frac{p_x}{\sqrt{\frac{\hbar e E}{v_F}}}, \quad \kappa_y \equiv \frac{p_y}{\sqrt{\frac{\hbar e E}{v_F}}}, \quad \tau \equiv \frac{t}{\sqrt{\frac{\hbar}{v_F e E}}}. \quad (2.34)$$

Trabajaremos en la base  $\Psi'' = Q(t) \Psi' = Q(t) S(t) \Psi$ , donde las matrices de transformación están definidas en las ecs. (2.7,2.13). Para la función de onda  $\Psi''(\tau) = (u''(\tau), v''(\tau))^T$ , la dinámica del sistema queda determinada por la ecuación (ver ec.(2.14))

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} \Psi''(\tau) = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \dot{\varphi}(\tau) e^{i2\alpha(\tau)} \\ \dot{\varphi}(\tau) e^{-i2\alpha(\tau)} & 0 \end{pmatrix} \Psi''(\tau), \quad (2.35)$$

con la condición inicial  $\Psi''(0) = (0, 1)^T$ . Para el caso del campo eléctrico constante en términos de variables adimensionales, tenemos que para  $\tau > 0$

$$\begin{aligned} \epsilon_p(\tau) &= \sqrt{(\kappa_x - \tau)^2 + \kappa_y^2}, & \alpha(\tau) &= \int_0^\tau \epsilon_p(\tau') d\tau' \\ \varphi(\tau) &= \arctan \frac{\kappa_y}{\kappa_x - \tau}, & \dot{\varphi}(\tau) &= \frac{\kappa_y}{\epsilon_p(\tau)^2}, \end{aligned} \quad (2.36)$$

para tiempos negativos  $\tau < 0$ , se aplican las expresiones anteriores poniendo  $\tau = 0$ , y  $\dot{\varphi}(\tau) = 0$ .

En la figura 2.1 presentamos una gráfica de los eigenvalores  $\pm\epsilon_\pm(\tau)$  y la función  $\dot{\varphi}(\tau)$  como función del tiempo. Observamos que la región no-adiabática de máximo acercamiento se da al tiempo  $\tau = \kappa_x$ , con una separación proporcional a  $2\kappa_y$ . La función  $\dot{\varphi}(\tau)$  aparece en el término no diagonal del hamiltoniano en la ec.(2.35), por lo que produce transiciones entre los niveles

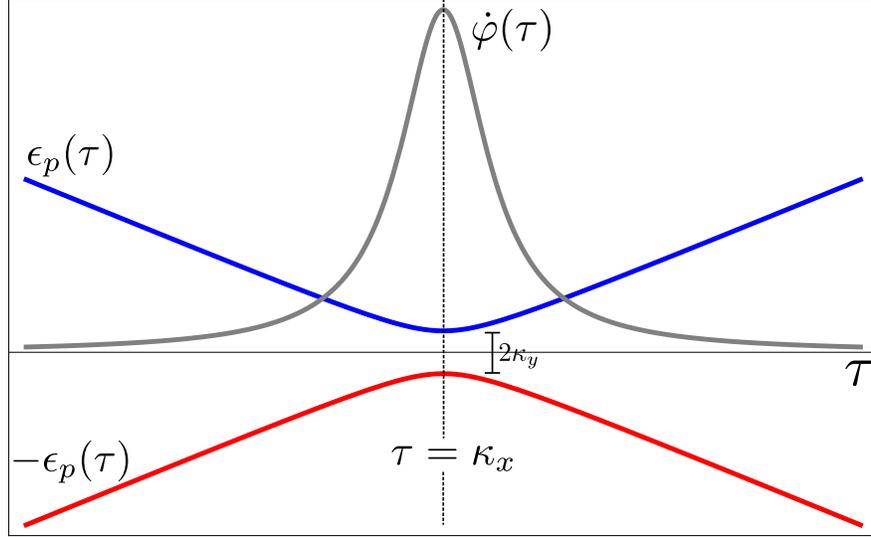


Figura 2.1: Gráfica cualitativa de los eigenvalores instantáneos de la energía  $\pm\epsilon_p$  en función del tiempo adimensional  $\tau$ . Observamos que la región no-adiabática se da alrededor del punto  $\tau^* = \kappa_x$ . Se incluye también la función  $\dot{\varphi}(\tau)$  que produce la transición entre los dos estados.  $\dot{\varphi}(\tau)$  es una distribución Lorentziana resonante en el mismo punto  $\tau^* = \kappa_x$ , con una altura  $1/\kappa_y$  y anchura  $\kappa_y$ .

de energía negativa y positiva, y tiene una forma Lorentziana con altura  $1/\kappa_y$  y anchura  $\kappa_y$ . Debido a lo anterior tenemos que las contribuciones dominantes a la probabilidad de transición entre niveles provienen de valores pequeños de  $\kappa_y$ . El formalismo de Magnus nos permite evaluar de forma aproximada la probabilidad de transición tomando en cuenta estos elementos.

En el límite de campo eléctrico intenso se produce una contribución importante debido a la transición resonante entre los niveles de energía negativa y positiva, lo cual sucede cuando  $\kappa_y$  es pequeña, es decir

$$\kappa_y = \kappa \sin \theta \ll 1, \quad \Leftrightarrow \quad \hbar k^2 v_F \sin \theta \ll e E_0, \quad (2.37)$$

donde  $\kappa = \sqrt{\kappa_x^2 + \kappa_y^2}$ ,  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$  y  $\theta$  es el ángulo entre las direcciones del momento  $\mathbf{p}$  y del campo eléctrico  $\mathbf{E}$ .

El operador de evolución correspondiente a la ec.(2.35), se evalúa de acuerdo al desarrollo de Magnus a primer orden, ecs. (2.25,2.27), con lo cual ob-

tenemos

$$U(\tau) \simeq e^{-i \int_0^\tau d\tau' H(\tau')} = \cos(|I|) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - i \frac{\sin(|I|)}{|I|} \begin{pmatrix} 0 & I \\ I^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

donde la función  $I$  está dada por

$$I(\tau) = \frac{1}{2} \int_0^\tau \dot{\varphi} d\tau' e^{2i\alpha(\tau')} = \frac{1}{2} \int_{\tau_0}^\tau d\tau' \frac{\kappa_y}{(\kappa_x - \tau')^2 + \kappa_y^2} e^{2i\alpha(\tau')}. \quad (2.39)$$

Tomando en cuenta la expresión (2.38) para el operador de evolución podemos determinar las componentes de la función de onda

$$\Psi''(\tau) = (u''(\tau), v''(\tau))^T = U(\tau) (0, 1)^T:$$

$$\begin{aligned} u''(\tau) &= -i \frac{I(\tau)}{|I(\tau)|} \sin(|I(\tau)|), \\ v''(\tau) &= \cos(|I(\tau)|). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Tal y como observamos anteriormente  $\dot{\varphi}$  tiene la forma de una distribución Lorentziana, centrada en  $\tau_R = \kappa_x$ , que es resonante para  $\kappa_y$  pequeña. Esto nos permite obtener una buena aproximación para  $I(\tau)$  ya que se justifica hacer una expansión a primer orden de la función  $\alpha(\tau')$  alrededor de  $\tau_R = \kappa_x$  [46]:  $\alpha(\tau') \simeq \alpha(\tau_R) + \alpha'(\tau_R)(\tau' - \tau_R) = \alpha(\kappa_x) + \kappa_y(\tau' - \kappa_x)$ , con lo cual tenemos que

$$I(\tau) \approx \frac{1}{2} e^{2i\alpha(\kappa_x)} \int_0^\tau \dot{\varphi} d\tau' e^{2i\kappa_y(\tau' - \kappa_x)} = \frac{1}{2} e^{2i\alpha(\kappa_x)} \int_{\varphi_0}^{\varphi(\tau)} d\varphi e^{-2i\kappa_y^2 \cot \varphi}. \quad (2.41)$$

En el último término del lado derecho utilizamos las ecs. (2.36) para expresar el integrando en términos del ángulo  $\varphi$ . El rango de integración comprende la región  $0 < \varphi_0 \leq \varphi(\tau) \leq \pi$ . Por lo cual podemos deformar el contorno de integración (sin encontrar singularidades), de tal manera que se localice ligeramente arriba del eje  $\varphi$  real:  $\varphi = \varphi' + i\varphi''$ , con  $\varphi''$  positivo y  $|\varphi''| \ll 1$ . En este caso notamos que se cumple la relación  $|e^{2i\varphi}| < 1$ . Esta condición será utilizada posteriormente para justificar el uso que haremos de una expansión en términos de polinomios de Laguerre generalizados.

Observamos que el integrando en la ec.(2.41) lo podemos reescribir de forma conveniente como

$$e^{-2i\kappa_y^2 \cot \varphi} = e^{-2\kappa_y^2} \exp\left(-4\kappa_y^2 \frac{e^{2i\varphi}}{1 - e^{2i\varphi}}\right). \quad (2.42)$$

Utilizamos la siguiente expresión para el generador de los polinomios de Laguerre generalizados [51]

$$\frac{1}{(1-u)^{\alpha+1}} e^{-\frac{ux}{1-u}} = \sum_{n=0}^{\infty} u^n L_n^{(\alpha)}(x), \quad (2.43)$$

donde  $|u| < 1$  y  $L_n^{(\alpha)}$  es el polinomio generalizado de Laguerre de orden  $n$ . Vemos que seleccionando  $\alpha = -1$  e identificando  $u = e^{2i\varphi}$  y  $x = 4\kappa_y^2$ , tenemos que la ec.(2.42) toma la siguiente forma

$$e^{-2i\kappa_y^2 \cot \varphi} = e^{-2\kappa_y^2} \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{(-1)}(4\kappa_y^2) e^{2in\varphi}. \quad (2.44)$$

La integral sobre  $\varphi$  en la ec.(2.41) es ahora directa obteniendo

$$I(\tau) \approx \frac{1}{2} e^{2i\alpha(\kappa_x)} e^{-2\kappa_y^2} F(\tau). \quad (2.45)$$

donde

$$\begin{aligned} F(\tau) &= \sum_{n=0}^{\infty} F_n(\tau), & F_0(\tau) &= \varphi(\tau) - \varphi_0, \\ F_n(\tau) &= \frac{1}{2in} L_n^{(-1)}(4\kappa_y^2) (e^{2in\varphi(\tau)} - e^{2in\varphi_0}), & n &\geq 1. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Inicialmente el sistema se encuentra en un nivel de energía negativa con momento  $\mathbf{p} = \hbar(k_x, k_y)$  y al tiempo  $t = t_0$  se enciende un campo eléctrico constante  $E_0$ . La probabilidad de transición del estado de energía negativa a un estado de energía positiva, con el mismo valor del momento, queda determinado de acuerdo a las ecuaciones (2.40,2.45,2.46) como

$$P_{\mathbf{p}}^+(\tau) \equiv n_{\mathbf{p}}(\tau) = |u''(\tau)|^2 = \sin^2 \left[ \frac{1}{2} e^{-2\kappa_y^2} |F(\tau)| \right]. \quad (2.47)$$

Mientras que la probabilidad de que permanezca en el estado de energía negativa está dada por  $P_{\mathbf{p}}^-(\tau) = |v''(\tau)|^2 = \cos^2 \left[ \frac{1}{2} e^{-2\kappa_y^2} |F(\tau)| \right]$ , cumpliendo la condición  $P_{\mathbf{p}}^+(\tau) + P_{\mathbf{p}}^-(\tau) = 1$ , lo cual queda asegurado a todo tiempo debido a que la aproximación de Magnus preserva la unitariedad del operador de evolución. Notamos que debido a las condiciones iniciales, la probabilidad  $P_{\mathbf{p}}^+(\tau)$

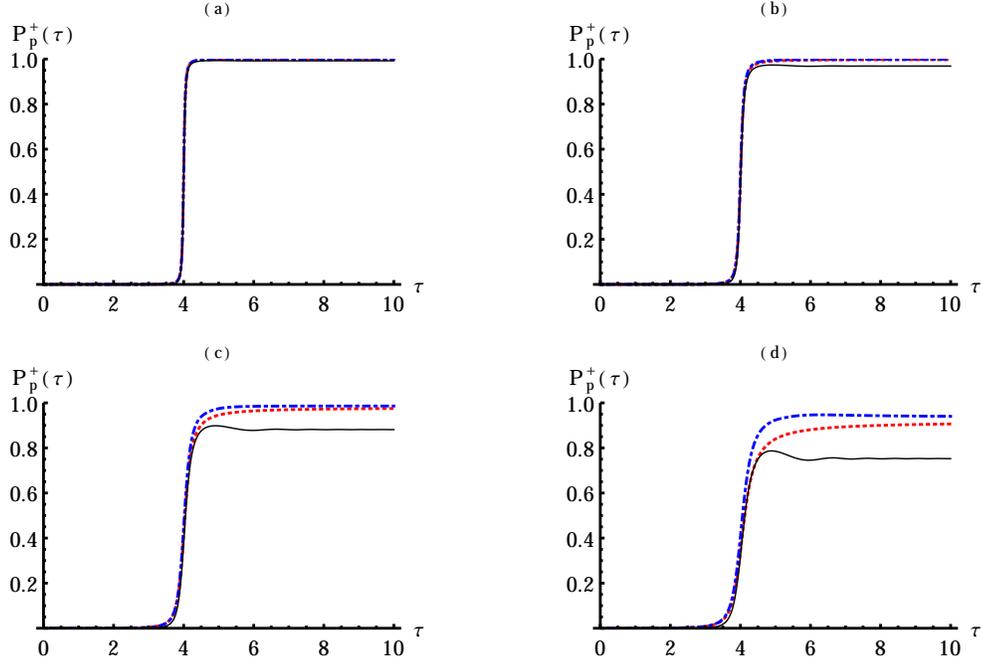


Figura 2.2: Dependencia temporal de la probabilidad de transición al nivel de energía positiva  $P_{\mathbf{p}}^+(\tau)$ . La curva negra continua presenta la solución numérica exacta. La línea roja a rayas corresponde a la solución analítica ec.(2.45) incluyendo solamente el término  $F_0(\tau)$  de la ec.(2.46). La línea azul punteada incluye los términos oscilatorios de la serie ec.(2.46), hasta un valor máximo  $n_{max}$ . El valor de  $\kappa_x = 4$  es el mismo en todas las gráficas. El momento transversal y  $n_{max}$  se seleccionan como: (a)  $\kappa_y = 0.05$ ,  $n_{max} = 0$ ; (b)  $\kappa_y = 0.1$ ,  $n_{max} = 0$ ; (c)  $\kappa_y = 0.2$ ,  $n_{max} = 3$ ; y (d)  $\kappa_y = 0.3$ ,  $n_{max} = 4$ .

coincide con el número de ocupación  $n_{\mathbf{p}}(\tau)$  del estado de energía positiva. El hueco correspondiente se comporta como un portador de carga positiva, por lo tanto  $n_{\mathbf{p}}(\tau)$  representa también el número de pares electrón-hueco de momento  $\mathbf{p}$ .

En la figura 2.2 comparamos los resultados para la evolución temporal de la probabilidad de transición  $P_{\mathbf{p}}^+(\tau)$  obtenidos con la fórmula de la ec.(2.47), para varios valores de los momentos adimensionales  $(\kappa_x, \kappa_y)$ , con los resultados numéricos, los cuales se pueden determinar con gran precisión resolviendo las ecuaciones diferenciales que se obtienen al aplicar el método de las álgebras de Lie, tal y como se explica en el apéndice.

El tiempo  $t^*$  al cual sucede la transición queda determinado por la componente longitudinal del momento, expresado en cantidades adimensionales, tenemos que  $\tau^* = \kappa_x$ . Utilizando las ecs. (2.34) obtenemos  $t^* = p_x/eE_0$ . Este comportamiento queda determinado esencialmente por el primer término  $F_0(\tau)$  de la expansión para la función  $F(\tau)$  en las ecs. (2.46), explícitamente tenemos que

$$F_0(\tau) = \varphi(\tau) - \varphi_0 = \arctan \frac{\kappa_y}{\kappa_x - \tau} - \arctan \frac{\kappa_y}{\kappa_x - \tau_0}, \quad (2.48)$$

donde utilizamos la definición en la ec.(2.36). La fórmula anterior muestra claramente que la transición sucede en  $\tau^* = \kappa_x$ . De hecho en el límite  $\kappa_y \rightarrow 0$ , la función  $F_0(\tau)$  en la ec.(2.48) resulta ser proporcional a la función escalón

$$F_0(\tau) = \pi \theta(\kappa_x - \tau_0) \theta(\tau - \kappa_x), \quad (2.49)$$

en acuerdo con lo que se espera en el límite de la transición repentina. Si el tiempo inicial se selecciona como  $\tau_0 = 0$  notamos que sólo valores positivos de  $\kappa_x$  contribuyen a la transición. Para  $\kappa_y \ll 1$  tenemos el límite de la transición repentina con  $P_{\mathbf{p}}^+(\tau_\infty) \approx 1$ , es decir tenemos una inversión completa de la población. Conforme  $\kappa_y$  crece, nos acercamos a la región adiabática, el valor  $P_{\mathbf{p}}^+(\tau_\infty)$  decrece monótonamente.

En las gráficas 2.2, en todos los casos elegimos  $\kappa_x = 4$ ; mientras que  $\kappa_y = 0.05$  (a),  $\kappa_y = 0.1$  (b),  $\kappa_y = 0.2$  (c) y  $\kappa_y = 0.3$  (d). Observamos que para valores pequeños de  $\kappa_y$  la ec.(2.47) produce una muy buena aproximación, y de hecho es suficiente con incluir solamente el primer término,  $F_0(\tau)$ , de la serie en ec.(2.46). Conforme  $\kappa_y$  crece, fig. 2.2 (c) y (d), es necesario incluir los primeros términos de la serie para obtener convergencia. En el caso  $\kappa_y = 0.2$  (c) incluimos los primeros 3 términos y 4 términos para  $\kappa_y = 0.3$  (d). En estos casos el acuerdo con la expresión (2.47) representa una buena aproximación en la región de transición ( $\tau \sim \kappa_x$ ), pero el valor asintótico  $P_{\mathbf{p}}^+(\tau_\infty)$  difiere entre un 10 – 20 % del valor exacto. Tomando en cuenta que las observables físicas que discutiremos posteriormente son dominadas por las contribuciones de  $\kappa_y$  pequeña, podemos considerar que el formalismo de Magnus utilizado es una muy buena aproximación.

Es interesante observar que para valores mayores de  $\kappa_y = 1$ , fig. 2.3, el formalismo reproduce de manera adecuada las oscilaciones dominantes que aparecen en la región de transición. Dicha dinámica transitoria requiere incluir los términos oscilantes en las fórmulas (2.46,2.47). En el cálculo incluimos los primeros 20 términos  $F_n(\tau)$  de la serie (2.46). Las oscilaciones se

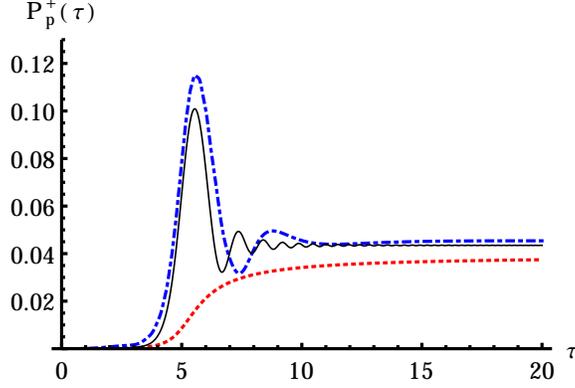


Figura 2.3: Dependencia temporal de  $P_{\mathbf{p}}^+(\tau)$ . La curva negra continua presenta la solución numérica exacta. La línea roja a rayas corresponde a la solución analítica ec.(2.45) incluyendo solamente el término  $F_0(\tau)$ . La línea azul punteada incluye los términos oscilatorios de la serie ec.(2.46), hasta un valor máximo  $n_{max} = 20$ . Los parámetros se seleccionan como  $\kappa_x = 5$  y  $\kappa_y = 1$ .

deben a la interferencia entre los estados de energía positiva y los de energía negativa, es decir se pueden considerar un efecto del Zitterbewegung.

Tomando en cuenta que  $P_{\mathbf{p}}^+(\tau)$  en realidad depende de la diferencia  $\tau - \kappa_x$ , vemos que gráficas similares a las de las figuras 2.2 y 2.3 representarían la distribución de momentos longitudinales  $\kappa_x$  a un tiempo fijo  $\tau$ . También hacemos notar que nuestro formalismo nos permite estimar la duración del intervalo de tiempo  $\Delta\tau$  que le toma a la partícula para tunear del estado de energía negativa al de energía positiva. Consideremos la ec.(2.48), por simplicidad consideramos el tiempo inicial  $\tau_0 \rightarrow -\infty$ . Estimamos  $\Delta\tau = \kappa_x - \tau$  como el tiempo requerido para alcanzar un valor igual al 0.9 del máximo valor alcanzado asintóticamente,  $F_0(\tau_\infty) = \pi$ . Con lo cual obtenemos  $\kappa_y/\Delta\tau = \tan(0.9\pi)$ . Es decir  $\Delta\tau \approx 3\kappa_y$ , expresado en términos de cantidades dimensionales tenemos

$$\Delta t \approx \frac{3p_y}{eE_0}. \quad (2.50)$$

El resultado es consistente con el hecho de que para un campo eléctrico intenso  $\kappa_y \ll 1$ , recuperamos el caso de una transición repentina  $\Delta\tau \rightarrow 0$ . En las gráficas podemos constatar que la formula  $\Delta\tau \approx 3\kappa_y$  nos brinda una estimación adecuada del tiempo requerido en el proceso de tunelaje.

A partir del número de ocupación de los niveles de energía positiva,  $n_{\mathbf{p}}(\tau) \equiv P_{\mathbf{p}}^+(\tau)$ , ec.(2.47), podemos calcular el número de pares electrón-hueco  $n(t)$  creados por unidad de superficie como función del tiempo. Esto se obtiene integrando sobre los momentos de acuerdo a la siguiente expresión

$$n(t) = g \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} n_{\mathbf{p}}(\tau), \quad (2.51)$$

donde  $g = 4$  es el factor de degeneración de espín y de valle. Utilizando la ec.(2.34), podemos expresar  $n(t)$  de la siguiente forma

$$n(t) = \frac{eE_0}{\pi^2\hbar v_F} \tilde{n}(\tau), \quad \tilde{n}(\tau) = \int n_{\mathbf{p}}(\tau) d^2\kappa, \quad (2.52)$$

donde  $\tilde{n}(\tau)$  se escribe en términos de variables adimensionales.

Tomando en cuenta que en general la contribución dominante a  $n_{\mathbf{p}}(\tau)$  proviene de valores pequeños de  $\kappa_y$ , podemos obtener una aproximación analítica válida para  $\tilde{n}(\tau)$ . Existen dos regiones separadas por un tiempo característico; el tiempo de Schwinger  $t_S$  se sigue de un análisis dimensional del problema, ver ec.(2.34), al hacer  $\tau = 1$  obtenemos

$$t_S = \sqrt{\frac{\hbar}{v_F e E_0}}. \quad (2.53)$$

**Región I**,  $t \geq t_S$  ( $\tau \geq 1$ ). En este caso se cumplen las condiciones  $\kappa_y \ll (\kappa_x, \tau)$ . Como comentamos anteriormente para  $\kappa_y \ll 1$ , el primer término  $F_0(\tau)$  de la serie en la ec.(2.46) resulta ser proporcional a la función escalón  $F_0(\tau) = \pi \theta(\kappa_x) \theta(\tau - \kappa_x)$ , aquí se utilizó la ec.(2.49) con  $\tau_0 = 0$ . Adicionalmente podemos comprobar que el resto de los términos de la serie  $F_n(\tau)$ ,  $n \geq 1$  se cancelan en este límite. Por lo que utilizando las ecs. (2.47,2.49) obtenemos

$$\tilde{n}(\tau) \approx \int d^2\kappa \theta(\kappa_x) \theta(\tau - \kappa_x) \sin^2 \left( \frac{\pi}{2} e^{-2\kappa_y^2} \right) \approx 1.2 \tau. \quad (2.54)$$

Sustituyendo este resultado en la primera de las ecs. (2.52) y tomando en cuenta que  $\tau = t\sqrt{v_F e E_0/\hbar}$ , ec.(2.34), obtenemos el siguiente resultado para el número de pares electrón-hueco por unidad de superficie creados al tiempo  $t$

$$n(t) \approx \frac{1.2}{\pi^2 v_F^{1/2}} \left( \frac{eE_0}{\hbar} \right)^{3/2} t, \quad t \geq t_S. \quad (2.55)$$

Es de destacar que este resultado coincide esencialmente (difere por un factor de 1.2) con la fórmula de Schwinger para la tasa de producción de pares en un sistema bidimensional, ver segundo renglón de la ec.(2.4). La tasa de producción de pares crece linealmente con el tiempo, y muestra un comportamiento no lineal con respecto al campo eléctrico, característico del fenómeno de Schwinger en dos dimensiones  $n(t) \propto E_0^{3/2}$ .

**Región II**,  $t \ll t_S$  ( $\tau \ll 1$ ). En este caso se cumplen las condiciones  $(\kappa_y, \tau) \ll 1$ . Para obtener una estimación de  $\tilde{n}(\tau)$  cuando  $\tau \ll 1$ , separamos la integral sobre la magnitud del momento, ec.(2.52), en dos regiones (a)  $\kappa \leq \tau$  y (b)  $\kappa > \tau$ . En la región (a) expandimos la función  $F_0(\tau)$  en potencias de  $\kappa/\tau$  obteniendo  $F_0(\tau) \approx \pi - \theta - \kappa \sin \theta/\tau$ , donde el ángulo  $\theta$  determina la dirección del momento respecto a la dirección del campo eléctrico. Considerando solamente el término dominante en  $\tau$ , se demuestra que la contribución a la tasa de creación  $\tilde{n}^{(a)}(\tau)$ , proveniente de la región (a), está dada por

$$\begin{aligned} \tilde{n}^{(a)}(\tau) &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\tau d\kappa \kappa \sin^2 \left( \frac{1}{2} e^{-2\kappa_y^2} \left( \frac{\kappa}{\tau} \sin \theta + \theta - \pi \right) \right) \quad (2.56) \\ &\approx \tau^2 \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^1 d\xi \sin^2 \left( \frac{\xi \sin \theta + \theta - \pi}{2} \right) \approx 1.09 \tau^2, \end{aligned}$$

para obtener la expresión del segundo renglón se realizó el cambio de variable  $\xi = \kappa/\tau$ , lo cual permite extraer el término  $\tau^2$  de la integral, después de lo cual podemos tomar el término dominante haciendo  $\tau = 0$  dentro de la integral resultante.

En la región (b) ( $\kappa > \tau$ ) expandimos la función  $F_0(\tau)$  en potencias de  $\tau/\kappa$  obteniendo  $F_0(\tau) \approx \tau \sin \theta/\kappa$ , lo cual da lugar a la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \tilde{n}^{(b)}(\tau) &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_\tau^\infty d\kappa \kappa \sin^2 \left( \frac{\tau}{2\kappa} \sin \theta e^{-2\kappa_y^2} \right) \quad (2.57) \\ &\approx \frac{\tau^2}{4} \int_0^{2\pi} d\theta \int_1^\infty d\xi \frac{1}{\xi} \sin^2 \theta \exp(-4\tau^2 \xi^2 \sin^2 \theta), \end{aligned}$$

la segunda expresión se obtiene considerando que el argumento de la función seno es pequeño y manteniendo el término dominante de una expansión en serie, después de lo cual se efectúa el cambio de variable  $\xi = \kappa/\tau$ . Nuevamente separamos un término  $\tau^2$ , pero en este caso no podemos hacer  $\tau = 0$  en la integral resultante, porque se vuelve divergente. Sin embargo podemos efectuar la integral sobre la variable  $\xi$ , utilizando el siguiente resultado

$$\int_1^\infty d\xi \frac{1}{\xi} e^{-z\xi^2} = \frac{1}{2} E_1(z) \approx \frac{1}{2} (\gamma + \ln z), \quad (2.58)$$

donde  $E_1(z)$  es la función exponencial integral y en la segunda relación se expande  $E_1(z)$  a primer orden en  $z$ ,  $\gamma = 0.577216$  es la constante de Euler. Al sustituir el resultado de la ec.(2.58) en la ec.(2.57) y tomando en cuenta que  $z \equiv \tau^2 \sin^2 \theta$ , podemos llevar a cabo la integral angular para obtener

$$\tilde{n}^{(b)}(\tau) \approx \frac{\pi}{8} \tau^2 (1.19 - \ln(16\tau^2)) . \quad (2.59)$$

Sumando este resultado con el de la ec.(2.56) obtenemos finalmente para  $\tau < 1$  la siguiente estimación

$$\tilde{n}(\tau) \approx \tau^2 (1.6 - 0.4 \ln(16\tau^2)) . \quad (2.60)$$

La sustitución de la expresión anterior para  $\tilde{n}(\tau)$  en la ecuación (2.52) y utilizando  $\tau = t\sqrt{v_F e E / \hbar}$ , ecs. (2.34), da como resultado

$$n(t) \approx 1.6 \left( \frac{eE_0}{\pi\hbar} \right)^2 t^2 \left( 1 - 0.25 \ln \left( \frac{4t}{t_S} \right)^2 \right) , \quad t \ll t_S . \quad (2.61)$$

En esta ecuación vemos que para tiempos cortos,  $t < t_S$  la producción de pares muestra una dependencia temporal cuadrática, con una corrección logarítmica.

Los resultados anteriores se comprueban al realizar una integración numérica de  $n_{\mathbf{p}}(\tau)$  sobre los momentos, utilizando la solución completa de las ecs. (2.46,2.47). En la figura 2.4 se presenta la evolución temporal de la tasa de producción de pares  $\tilde{n}(\tau)$ . En efecto para  $\tau \geq 1$  se observa una dependencia lineal  $\tilde{n}(\tau) \propto \tau$  consistente con la ec.(2.54) y que da lugar a la fórmula de Schwinger para la producción de pares  $n(t)$  en la ec.(2.55). Sin embargo en la región de tiempos cortos  $\tau < 1$  la dependencia temporal deja de ser lineal, observándose un comportamiento cuadrático a tiempos muy cortos, en acuerdo con la ec.(2.61). Cabe destacar que si bien la contribución dominante a  $n_{\mathbf{p}}(\tau)$  proviene del término  $F_0(\tau)$  de la serie en la ec.(2.46), es necesario tomar en cuenta los primeros términos  $F_n(\tau)$ ,  $n \geq 1$ . En la figura 2.4 la línea punteada se obtiene incluyendo solamente  $F_0(\tau)$  en el cálculo. El resultado completo se obtiene incluyendo los siguientes tres términos de la serie, lo cual es suficiente para obtener convergencia.

Los resultados anteriores indican la transición entre dos regímenes separados por un tiempo característico  $t_S$ . El comportamiento varía no sólo en su dependencia temporal, sino también en la respuesta no-lineal con respecto a

la intensidad del campo eléctrico  $E_0$ . A tiempos largos,  $t \geq t_S$ , la producción de pares electrón-hueco  $n(t)$  crece linealmente con el tiempo, mientras que la dependencia no lineal con respecto al campo eléctrico es de la forma  $E_0^{3/2}$ . Por otro lado, para tiempos  $t < t_S$  se produce una transición a un régimen en el cual  $n(t)$  muestra una dependencia cuadrática respecto, tanto al tiempo, como al campo eléctrico, modificado por una corrección logarítmica. El término logarítmico se origina, a tiempos cortos, en las contribuciones de momentos grandes, sin embargo en la siguiente sección veremos que a tiempos aun mucho más cortos el comportamiento es lineal, correspondiente al régimen de campo eléctrico débil, el tiempo que delimita dicha región  $t_W$  está relacionado con un momento de corte que se introduce para tomar en cuenta la región finita de estados de energía que contribuyen al problema.

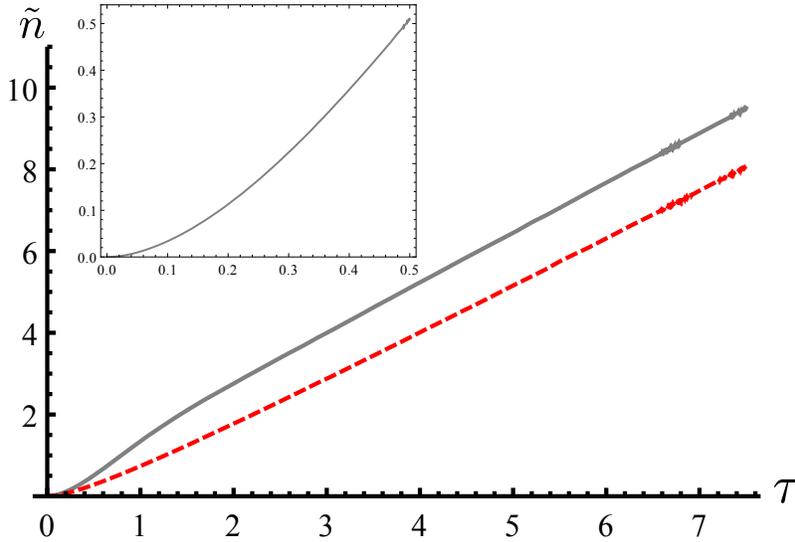


Figura 2.4: Evolución temporal de la densidad adimensional  $\tilde{n}(\tau)$  de pares electrón-hueco, ec.(2.52). La línea punteada roja se obtiene al incluir solamente el primer término  $F_0(\tau)$  de la serie ec.(2.46). La línea gris continua incluye los términos  $F_n(\tau)$ , hasta  $n = 3$ , requeridos para obtener un resultado convergente. En el recuadro se detalla el comportamiento a tiempos cortos  $\tau < 0.5$ .

En resumen la producción de pares electrón-hueco tiene un comportamiento no lineal respecto a la intensidad del campo eléctrico. La dependencia  $n \propto t E^{3/2}$ , había sido reportada en trabajos previos [31, 40, 41], donde se

utilizó la fórmula de Landau-Zener. En nuestro caso encontramos este comportamiento utilizando el formalismo de Magnus, el cual adicionalmente nos permite determinar el comportamiento a tiempos cortos, que toma la forma  $n \propto t^2 E^2$ , con una corrección logarítmica. La transición entre ambos regímenes se estima que sucede a un tiempo  $t \sim t_S \equiv \sqrt{\hbar/v_F e E_0}$ .

### 2.3.2. Corriente eléctrica

Nos interesa ahora calcular la corriente eléctrica que se produce en la configuración en la cual se van poblando los niveles de energía positiva, a partir de las transiciones que genera el campo eléctrico, considerando la condición inicial en la que solamente los niveles de energía negativa estaban ocupados. Como vimos en la sección anterior la probabilidad de transición  $P_{\mathbf{p}}^+(\tau)$  es proporcional al número de pares electrón-hueco inducidos por el campo eléctrico. Consideramos primero el régimen de campo eléctrico débil.

#### Campo eléctrico débil

En el límite de campo eléctrico débil se cumple la condición  $\kappa_y \leq 1$ ,  $\tau \ll 1 \ll \kappa$ . En este caso tenemos que  $\epsilon \sim \kappa$  y  $\dot{\varphi} \sim \kappa_y/\kappa^2$ . Lo anterior es válido excepto cerca de la región no-adiabática  $\tau \sim \kappa_x$  y se puede justificar si reinsertamos variables dimensionales en la ec.(2.35) y hacemos  $E_0 = 0$ , en todos lados, excepto en el numerador del término que incluye a  $\dot{\varphi}(\tau)$  y que determina las transiciones entre niveles de energía negativa y positiva. Considerando lo anterior podemos evaluar la integral que determina  $I(\tau)$ , ec.(2.39), para obtener  $I(\tau) = e^{i\kappa\tau} \kappa_y \sin(\kappa\tau)/2\kappa^3$ . Tomando en cuenta que  $n_{\mathbf{p}} = \sin^2(|I(\tau)|)$ , ver ec.(2.40), obtenemos

$$n_{\mathbf{p}}(\tau) = \sin^2 \left( \frac{\kappa_y \sin(\kappa\tau)}{2\kappa^3} \right) \approx \frac{\kappa_y^2}{4\kappa^6} \sin^2(\kappa\tau) . \quad (2.62)$$

El resultado anterior coincide con el obtenido en la referencia [31], a partir de una integración directa de la ecuación de Dirac en el límite de campo eléctrico débil, lo cual es consistente con la solución obtenida en este trabajo, ya que en el límite considerado las correcciones de Magnus de orden superior se cancelan.

Nos interesa conocer la contribución a la corriente debida a los términos de las corrientes de conducción (intrabanda) ec.(2.19), y de la corriente de

polarización (interbanda) ec.(2.21), lo cual requiere integrar sobre los momentos de acuerdo a la siguiente expresión, ver ec.(2.51),

$$J_i(t) = g \int \frac{d^2p}{(2\pi\hbar)^2} \langle j'_i(\tau) \rangle, \quad i = \{x, y\}, \quad (2.63)$$

con  $g = 4$ . En algunos casos la integral anterior puede ser divergente, al integrar sobre valores del momento que tienden a infinito; en estos casos se requiere incluir un corte o valor máximo del momento  $p_c = W/v_F$ ,  $W$  representa la región finita de estados de energía negativa que contribuyen al problema (*band-width*). Al integrar sobre los ángulos la corriente transversal a la dirección del campo eléctrico obviamente se cancela. En el caso de la corriente longitudinal, al considerar la expresión para  $n_{\mathbf{p}}(\tau)$  ec.(2.62) en el cálculo de la corriente de conducción ec.(2.19), observamos que el término independiente de  $n(\tau)$  desaparecerá al promediar sobre los momentos. Mientras que el resto de la contribución es de orden cuadrático en el campo eléctrico y como estamos considerando el límite de campo débil podemos despreciar su contribución.

Para la contribución de polarización obtenemos

$$J_x^{pol}(t) = \frac{e^2 E_0}{\pi^2 \hbar} \tilde{J}_x^{pol}(\tau), \quad \tilde{J}_x^{pol}(\tau) = 2 \int d^2\kappa \frac{\sin \varphi}{\dot{\varphi}} \frac{dn_{\kappa}(\tau)}{d\tau}, \quad (2.64)$$

donde utilizamos la ec.(2.21). Tomando en cuenta que  $\dot{\varphi} \approx \kappa_y/\kappa^2$ ,  $\sin \varphi \approx \kappa_y/\kappa$  y la ec.(2.62), se obtiene

$$\tilde{J}_x^{pol}(\tau) = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta \int_0^{\kappa_c} \frac{\sin(2\kappa\tau)}{\kappa} d\kappa = \frac{\pi}{2} Si(2\kappa_c\tau), \quad (2.65)$$

donde  $Si$  es la función seno-integral y el momento de corte adimensional está dado por  $\kappa_c = p_c \sqrt{v_F/\hbar e E_0} = W/\sqrt{\hbar v_F e E_0}$ . Combinando este resultado con la ec.(2.64) obtenemos

$$J_x^{pol}(t) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} E_0 Si(2\kappa_c\tau) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} E_0 Si\left(\frac{2Wt}{\hbar}\right). \quad (2.66)$$

Para tiempos cortos la corriente se incrementa linealmente con el tiempo de acuerdo a

$$J_x^{pol}(t) = \frac{e^2 W}{\pi\hbar^2} E_0 t. \quad (2.67)$$

El crecimiento lineal de la corriente se mantiene hasta un tiempo del orden  $t \sim t_W$ , donde

$$t_W = \frac{1}{v_F k_c} = \frac{\hbar}{W}. \quad (2.68)$$

Posteriormente muestra un comportamiento oscilatorio característico de la función  $Si$ . Para tiempos grandes  $t \gg t_W$ , tenemos que  $Si(2\kappa_c \tau) \rightarrow \pi/2$ , con lo que se obtiene el valor

$$J_x^{pol}(t) = \frac{e^2}{4\hbar} E_0. \quad (2.69)$$

De la última expresión podemos identificar la conductividad

$$\sigma = \frac{e^2}{4\hbar}. \quad (2.70)$$

Una de las propiedades más sorprendentes del grafeno es la existencia de un valor mínimo finito para la conductividad, que es del orden del cuanto de conductancia  $e^2/h$ , por grados de libertad de valle y de espín. Dicho valor se ha observado experimentalmente [28] al aproximarse a condiciones cercanas al punto de Dirac, es decir al considerar condiciones de temperatura y densidad de electrones tendiendo a cero. Aunque el resultado en la ec.(2.70) no coincide exactamente con dicha observación, el orden de magnitud es cercano. Y fue obtenido a partir de la estimación de los pares de electrón-hueco producidos por el efecto del campo eléctrico. Adicionalmente notamos que la contribución a dicho valor de la conductividad está asociado a la corriente de polarización, que como mencionamos se debe a las transiciones interbanda, que al referirse a transiciones entre estados de energía negativa y positiva se pueden identificar con el efecto de Zitterbewegung. Dicha relación entre la existencia de un valor mínimo finito para la conductividad y el fenómeno de Zitterbewegung fue identificado por M. Katsnelson [28] con base a un cálculo utilizando la fórmula de Kubo.

### Régimen no-lineal

En el régimen no-lineal o de campo eléctrico intenso se cumple en general la condición  $\kappa_y \ll 1$ , por lo cual se justifica emplear la solución obtenida en la ec.(2.47) para el número de pares electrón-hueco  $n_{\mathbf{p}}(\tau)$ . Utilizando este resultado en combinación con las ecs. (2.63,2.21) obtenemos para la corriente de polarización el siguiente resultado

$$J_x^{(pol)}(t) = -2ev_F g \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \frac{\sin \varphi}{\dot{\varphi}(t)} \frac{dn_{\mathbf{p}(t)}}{dt} \approx 0. \quad (2.71)$$

La contribución de la corriente de polarización es despreciable, esto se comprueba fácilmente ya que en la región  $t \geq t_S$  se tiene que  $\frac{\sin \varphi}{\varphi(t)} \approx (\kappa_x - \tau)$  y  $\frac{dn_{\mathbf{p}(t)}}{dt} \propto \delta(\kappa_x - \tau)$ , ver ec.(2.54). De forma análoga se comprueba que para  $t \ll t_S$  la corriente de polarización se puede despreciar.

La corriente de conducción se evalúa de forma directa considerando las ecs. (2.19,2.47,2.63), con lo que tenemos que

$$J_x^{(cond)}(t) = -ev_F g \int \frac{d^2p}{(2\pi\hbar)^2} \cos \varphi [2n_{\mathbf{p}}(t) - 1] \approx 2ev_F n(t). \quad (2.72)$$

El resultado se justifica si observamos que el término que no contiene la densidad de pares se cancela de forma exacta debido a la integración angular. Por otro lado en el término que incluye la densidad de pares  $n_{\mathbf{p}}$ , tenemos que dominan las contribuciones en las que  $\kappa_y \ll 1$ , por lo cual podemos aproximar  $\cos \varphi = (\kappa_x - \tau)/\epsilon(\tau) \approx 1$ , ver ec.(2.36). Tomando en cuenta lo anterior la integral resultante es la misma que da lugar a la densidad de pares electrón-hueco  $n(t)$ , ec.(2.36), con lo cual obtenemos el resultado de la ec.(2.72).

De acuerdo a los resultados obtenidos, la corriente total en el régimen no-lineal es debida a la corriente de conducción y resulta proporcional al producto  $2ev_F n(t)$ : de la carga, la velocidad ( $v_F$ ) de los portadores de carga y la densidad  $n(t)$ ; el factor 2 aparece ya que por cada par creado hay dos portadores de carga: un electrón y un hueco. Utilizando las expresiones obtenidas para  $n(t)$ , en las ecs. (2.61,2.55), la corriente eléctrica en el régimen no-lineal está dada por:

$$\begin{aligned} J_x(t) &= -3.2v_F e^3 \left(\frac{E_0}{\pi\hbar}\right)^2 t^2 \left(1 - 0.25 \ln \left(\frac{4t}{t_S}\right)^2\right), \quad t \ll t_S, \\ J_x(t) &= -\frac{2.4v_F^{1/2} e^{5/2}}{\pi^2} \left(\frac{E_0}{\hbar}\right)^{3/2} t, \quad t \geq t_S. \end{aligned} \quad (2.73)$$

A continuación analizamos las condiciones requeridas para observar los efectos de la creación de pares de Schwinger y el régimen de validez de las expresiones para la corriente en el régimen lineal ecs. (2.67,2.69) y en el no-lineal ecs. (2.73). Para llevar a cabo una estimación consideremos valores típicos de una muestra de grafeno cuadrada de lado  $L \sim 0.1 - 1 \mu m$ , y para el ancho de banda  $W$  (*band-width*) de la región de los estados de energía negativa utilizamos  $W \sim 1.3 eV$ . Con esto podemos estimar el tiempo  $t_W$ , ec.(2.68),

$t_W \sim 0.5 \text{ fs}$ . Para tiempos cortos  $t \sim t_W$ , la corriente queda determinada por la aproximación lineal, siempre y cuando  $t_W \ll t_S$ , lo cual implica para los valores del campo eléctrico  $E_0 \ll \hbar/(ev_F t_W^2)$ , que se estima como  $E_0 \ll 10^{11} \text{ V/m}$ , lo cual se cumple sobradamente aun para los campos eléctricos más intensos que se puedan considerar.

Por otro lado, para poder observar los efectos no lineales en la corriente eléctrica, ecs. (2.73), se requiere reducir los efectos de las colisiones, lo cual implica  $t_S \ll t_c$ , donde  $t_c$  es el tiempo promedio entre colisiones. Aun en el caso de muestras ultralimpias a bajas temperaturas, en el que se pueden despreciar las colisiones, el efecto está limitado por el tamaño finito de la muestra; se requiere que  $t_S < t_b$ , donde el tiempo balístico está dado por  $t_b = L/v_F$ , que se estima del orden  $t_b \sim 0.1 - 1 \text{ ps}$ . Para el valor del campo eléctrico la condición anterior se expresa como  $E_0 > \hbar/(ev_F t_b^2)$ , que da lugar a la siguiente estimación  $E_0 > 10^3 - 10^5 \text{ V/m}$ .

Con base en las consideraciones anteriores tenemos que para campos eléctricos intensos,  $E_0 > 10^3 - 10^5 \text{ V/m}$ , existe un rango de tiempos cortos  $t \ll t_S$  donde la corriente muestra un comportamiento lineal respecto al campo eléctrico aplicado  $J_x \propto E_0$ . En un rango de tiempos extremadamente cortos  $t < t_W$ , la corriente crece linealmente con el tiempo, ecs. (2.67). Mientras que en el rango de tiempos,  $t_W < t < 0.1 t_S$ , la corriente se estabiliza en un comportamiento cuasióhmico, ecs. (2.69),  $J_x = \sigma E_0$ , con  $\sigma = e^2/4\hbar$ . Este resultado es similar a la ley de Ohm, en el cual el efecto de las colisiones dan lugar a una velocidad terminal para los portadores de carga, al contrarrestar el efecto de la aceleración producida por el campo eléctrico y dando con ello lugar a una corriente constante. El resultado es análogo, sin embargo en este caso no se incluyen efectos de colisiones, la velocidad  $v_F$  de los portadores de carga permanece constante, ya que las partículas sin masa no son aceleradas por el campo eléctrico. Tal y como se comentó anteriormente, en el régimen lineal domina la corriente de polarización, por lo cual el efecto se identifica con el fenómeno de Zitterbewegung.

A partir del tiempo  $t > 0.1 t_S$  el sistema entra en el régimen no-lineal y la contribución dominante se transfiere a la corriente de conducción. En el rango de tiempo  $0.1 t_S < t < t_S$  la corriente crece de forma cuadrática con respecto al tiempo y al campo eléctrico, con una corrección logarítmica, dicho comportamiento refleja el crecimiento de la densidad de pares  $n(t)$ , producidos por el campo eléctrico. En el tiempo  $t \sim t_S$  se produce una transición a un régimen de crecimiento lineal respecto al tiempo y con una dependencia  $J_x \propto E_0^{3/2}$  característica de la creación de pares de Schwinger

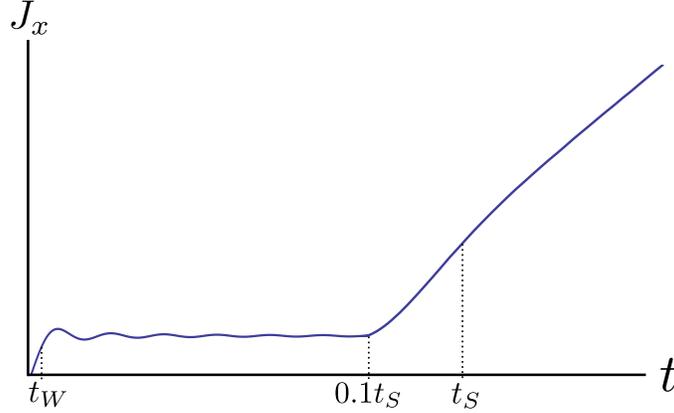


Figura 2.5: Comportamiento esquemático de la corriente en función del tiempo. Para tiempos cortos  $t < t_W$  el comportamiento es lineal ec.(2.67), sin embargo a tiempos algo mas grandes  $t > t_W$  la magnitud de la corriente permanece casi constante ec.(2.69). Al pasar al régimen no lineal existe una zona entre  $0.1t_S$  y  $t_S$  donde la corriente tiene un comportamiento cuadrático con una corrección logarítmica ecs. (2.73) y después se vuelve lineal en el tiempo con una dependencia en el campo eléctrico  $E^{3/2}$ .

en sistemas bidimensionales. En la figura 2.5 se presenta esquemáticamente una gráfica de la evolución temporal de la corriente.

El fenómeno de creación de pares de Schwinger se podría corroborar al medir la dependencia de la corriente eléctrica a tiempos cortos, verificando su dependencia temporal y su relación con la intensidad del campo eléctrico. Sin embargo hay efectos físicos adicionales, que deberían ser considerados y analizados para tener una visión mas completa del problema; entre ellos podemos mencionar el efecto de las colisiones entre electrones y con impurezas, así como el efecto de la recombinación de los pares electrón-hueco que fueron creados.

El comportamiento de la corriente respecto al campo eléctrico (lineal para campos pequeños y  $E^{3/2}$  para campos grandes) resulta ser robusto respecto al número de capas de grafeno. En la referencia [52] se reporta una dependencia similar para la corriente respecto al campo eléctrico aún para 4 capas de grafeno.

## Capítulo 3

# Grafeno irradiado por una onda electromagnética

En el capítulo anterior consideramos el efecto de un campo eléctrico constante sobre una capa de grafeno. En este capítulo estudiaremos el efecto de una onda electromagnética que incide perpendicularmente al plano del grafeno. Consideramos primero el caso de polarización lineal y en la última sección consideramos brevemente el caso de polarización circular.

El grafeno presenta una serie de propiedades electromagnéticas novedosas. Entre los ejemplos de importancia podemos mencionar los efectos no-lineales inducidos por la radiación, en particular la generación de armónicos de orden superior [53, 54, 55]. Por otro lado, la interacción de la luz con el grafeno induce brechas en el espectro de cuasienergía, que modifican las propiedades de transporte del grafeno [50, 56, 57, 58, 59]. Otro tema de interés notable son las propiedades topológicas inducidas por la irradiación del grafeno. Por ejemplo en el caso de polarización circular, se ha demostrado que si adicionalmente se aplica un voltaje-dc, se induce una corriente perpendicular tipo Hall, aún en ausencia de campo magnético [57]. Por otro lado se ha encontrado que la generación de brechas en el espectro de cuasienergía del grafeno, así como en otros sistemas, puede dar lugar a nuevas fases de los materiales que se denominan aislantes topológicos de Floquet [60, 61, 62].

En nuestro caso nos interesa estudiar la dinámica de los portadores de carga sujetos a un campo electromagnético en el modelo efectivo de la ecuación bidimensional de Dirac. El problema se puede plantear como un problema de dos niveles con una interacción periódica en el tiempo, por lo cual se puede aplicar el teorema de Floquet, lo cual nos permitirá en particular estudiar el

espectro de cuasienergías en los dos casos mencionados: polarización lineal y circular. Utilizaremos el formalismo de Magnus-Floquet (Sección 2.2.4), con la finalidad de estudiar la corriente inducida en el grafeno, así como la aparición de efectos no-lineales y la generación de radiación que contiene armónicos de orden mayor. Adicionalmente, calcularemos el campo de radiación que producen los portadores de carga del grafeno.

### 3.1. Polarización lineal, ecuación de evolución

Consideremos una onda electromagnética que incide perpendicularmente al plano en el que se encuentra el grafeno, dicha onda se encuentra polarizada linealmente y la dirección del campo eléctrico apunta a lo largo del eje ‘ $x$ ’. Seleccionando la posición del plano del grafeno con el punto  $z = 0$ , tenemos que el campo eléctrico y el potencial vectorial están dados por las siguientes expresiones

$$\mathbf{E} = E_0 (\cos(\omega t), 0) , \quad \mathbf{A} = \frac{E_0}{\omega} (-\sin(\omega t), 0) . \quad (3.1)$$

Hacemos notar que en la norma elegida el potencial escalar se cancela,  $\phi = 0$ . Para el sistema considerado conviene definir el siguiente conjunto de variables adimensionales:

$$\xi = \omega t \quad \kappa_x = \frac{v_F p_x}{\hbar \omega} \quad \kappa_y = \frac{v_F p_y}{\hbar \omega} \quad \lambda = \frac{v_F e E_0}{\hbar \omega^2} . \quad (3.2)$$

Con lo cual tenemos que la ecuación de Dirac bidimensional que describe la dinámica efectiva del grafeno en presencia de una onda electromagnética linealmente polarizada toma la forma

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} = [\sigma_1 (\kappa_x + \lambda \sin \xi) + \sigma_2 \kappa_y] \Psi . \quad (3.3)$$

#### 3.1.1. Solución exacta, propagación longitudinal

En general la ecuación de evolución (3.3) no tiene una solución exacta. Sin embargo en el límite  $\kappa_y = 0$  se puede obtener una solución explícita. En efecto se comprueba fácilmente que las soluciones están dadas por

$$\Psi_{\pm}(\xi) = e^{\mp i[\kappa \xi + \lambda(\cos \xi - 1)]} \chi_{\pm} , \quad \chi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (3.4)$$

Esta solución es consistente con el teorema de Floquet ec.(2.29). Esto se puede comprobar si escribimos la evolución de la función de onda como  $\Psi_{\pm}(\xi) = U(\xi)\Psi_{\pm}(0)$ , con la condición inicial  $U(0) = 1$ . De acuerdo al formalismo de Floquet el operador de evolución se puede expresar como [63, 45]  $U(\xi) = P(\xi)e^{i\xi F}$ , con  $F$  una matriz constante cuyos eigenvalores  $\epsilon$  son las cuasienergías del sistema. Mientras que la matriz  $P(\xi)$  es periódica:  $P(\xi + 2\pi) = P(\xi)$ . Explícitamente se obtiene

$$F = \kappa\sigma_1, \quad P(\xi) = \exp [i\sigma_1\lambda(\cos \xi - 1)]. \quad (3.5)$$

Hacemos notar que los valores de la pseudoenergía  $\epsilon$  no están unívocamente determinados, ya que el operador de evolución transformado  $U'(\xi) = U(\xi)e^{in\xi\mathbf{I}}$ , donde  $n$  es un número entero e  $\mathbf{I}$  es la matriz unidad, también da lugar a una solución de la ecuación de movimiento ec.(3.4) con el correspondiente valor de la cuasienergía  $\epsilon_n = \epsilon + n$ .

En particular notamos que las expresiones anteriores, ecs. (3.5), son consistentes con el formalismo de Magnus-Floquet (ver capítulo anterior ec.(2-30)) ya que la matriz  $P(\xi)$  se escribe como  $P(\xi) = \exp \Lambda(\xi)$ . Tomando en cuenta que las cuasienergías están determinados módulo  $n$ , tenemos que a partir de los eigenvalores de la matriz  $F$ , las cuasienergías (adimensionales) toman la siguiente forma

$$\epsilon_{\pm} = \pm \kappa + n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3... \quad (3.6)$$

válido para  $\kappa_y = 0$ . Si se restablecen las unidades, las cuasienergías están dadas como  $E_{\pm} = \pm \hbar v_F k + n \hbar \omega$ . La solución exacta muestra que para una polarización longitudinal de la onda paralela al movimiento de los portadores de carga ( $\kappa_y = 0$ ), el espectro de cuasienergías corresponde al de una serie de conos de Dirac con cruces exactos en los puntos  $(\epsilon, \kappa_x) = (n, m)$  y  $(\epsilon, \kappa) = (n + 1/2, m + 1/2)$ , donde  $n$  y  $m$  son números enteros.

### 3.1.2. Formalismo de Floquet

Consideremos ahora el caso en el que el momento de los portadores de carga apunta en una dirección arbitraria, con un ángulo  $\theta$  respecto a la dirección del campo eléctrico, es decir  $\theta \equiv \arctan \left( \frac{\kappa_y}{\kappa_x} \right)$ . Aplicando la transformación  $\phi(\xi) = e^{i\theta\sigma_3/2}\Psi(\xi)$ , tenemos que en términos del espinor  $\phi(\xi)$  la ecuación de movimiento (3.3) toma la siguiente forma

$$i \frac{d\phi(\xi)}{d\xi} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa - \lambda e^{i\theta} \sin(\xi) \\ \kappa - \lambda e^{-i\theta} \sin(\xi) & 0 \end{pmatrix} \phi(t). \quad (3.7)$$

Tal y como comentamos anteriormente, esta ecuación tiene una solución exacta sólo en el caso en que  $\theta = 0$ . Para obtener una solución numérica utilizamos el teorema de Floquet que nos permite escribir la función de onda como [64]

$$\phi(\xi) = e^{i\epsilon\xi} \bar{\phi}(\xi), \quad \bar{\phi}(\xi + 2\pi) = \bar{\phi}(\xi). \quad (3.8)$$

notamos que  $\bar{\phi}(\xi)$  es una función periódica y  $\epsilon$  representan la cuasienergía del sistema, la cual está determinada módulo  $n$ . La periodicidad del espinor  $\bar{\phi}$  nos permite expresar cada una de sus componentes en una expansión de Fourier, es decir

$$\bar{\phi}(\xi) = \begin{pmatrix} f(\xi) \\ g(\xi) \end{pmatrix}, \quad f(\xi) = \sum_n f_n e^{in\xi}, \quad g(\xi) = \sum_n g_n e^{in\xi}. \quad (3.9)$$

Al sustituir las expresiones (3.8) y (3.9) en la ec.(3.7) encontramos las siguientes relaciones de recurrencia

$$\begin{aligned} \kappa g_n + (n + \epsilon) f_n + i \frac{\lambda}{2} e^{i\theta} g_{n-1} - i \frac{\lambda}{2} e^{i\theta} g_{n+1} &= 0, \\ \kappa f_n + (n + \epsilon) g_n + i \frac{\lambda}{2} e^{-i\theta} f_{n-1} - i \frac{\lambda}{2} e^{-i\theta} f_{n+1} &= 0. \end{aligned} \quad (3.10)$$

En el límite en el que se apaga la constante de acoplamiento,  $\lambda \rightarrow 0$ , las ecuaciones anteriores se desacoplan para valores diferentes de  $n$ , permitiendo obtener los siguientes resultados exactos

$$\epsilon_n^+ = +\kappa + n, \quad \epsilon_m^- = -\kappa + m, \quad (3.11)$$

donde  $n$  y  $m$  son números enteros. Estas soluciones coinciden con las obtenidas para  $\theta = 0$ , ec.(3.6). En este caso el ángulo es arbitrario, pero  $\lambda = 0$ .

Para analizar el conjunto de ecuaciones acopladas (3.10) en general, es conveniente definir un vector  $\Phi$  de la forma  $\Phi^T \equiv (\dots, f_{-1}, g_{-1}, f_0, g_0, f_1, g_1, \dots)$  con  $\Phi_0 = f_0$ ,  $\Phi_1 = g_0$ , etc., con lo que podemos escribir las relaciones de recurrencia anteriores ecs. (3.10) como la ecuación de eigenvalores  $\mathcal{H}\Phi = \epsilon\Phi$ ,

donde  $\mathcal{H}$  es una matriz de dimensión infinita dada por

$$\begin{pmatrix} \ddots & & & \vdots & \vdots & & & \\ & n-1 & k & 0 & -\frac{1}{2}ie^{i\theta}\lambda & 0 & 0 & \\ & k & n-1 & -\frac{1}{2}ie^{-i\theta}\lambda & 0 & 0 & 0 & \\ & 0 & \frac{1}{2}ie^{i\theta}\lambda & n & k & 0 & -\frac{1}{2}ie^{i\theta}\lambda & \\ \frac{1}{2}ie^{-i\theta}\lambda & 0 & 0 & k & n & -\frac{1}{2}ie^{-i\theta}\lambda & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}ie^{i\theta}\lambda & n+1 & k & \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}ie^{-i\theta}\lambda & 0 & 0 & k & n+1 & \\ & & & \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

Esta representación es muy útil porque nos permite determinar el espectro de cuasienergías, al truncar y diagonalizar numéricamente la matriz  $\mathcal{H}$ . Cabe señalar que truncar el hamiltoniano  $\mathcal{H}$  a una matriz de dimensión  $n \times n$ , corresponde a incluir  $n$  modos de la onda electromagnética en la interacción con los portadores de carga del grafeno.

En las figuras 3.1 y 3.2 se muestra la relación de dispersión como función de la magnitud del momento adimensional  $\kappa$ , para diferentes selecciones del ángulo  $\theta$  y de la constante de acoplamiento  $\lambda$ . La matriz truncada se selecciona de dimensión adecuada para lograr la convergencia en los resultados que se presentan en las gráficas. Los resultados se pueden entender a partir del efecto que produce el acoplamiento  $\lambda$  finito sobre las expresiones exactas, ec.(3.11), que se obtienen para  $\lambda = 0$ . Cuando  $\lambda = 0$  el espectro consiste de una serie de réplicas de conos de Dirac cuyos vértices coinciden con los cruces de las soluciones  $\epsilon_n^+$  y  $\epsilon_m^-$ , localizados en  $\kappa = \frac{1}{2}(m - n)$ . El efecto del acoplamiento finito, además de desplazar la posición de los vértices, da lugar en general a cruces evitados (repulsión de niveles). Sin embargo, observamos que en ocasiones se mantienen los cruces exactos. Esto sucede cuando es posible definir un operador de simetría que conmuta con el hamiltoniano [64]. Los estados con una misma simetría se mezclan por efecto de la interacción en el punto de cruce, dando lugar a una brecha. Pero en el caso de cruces de niveles caracterizados por diferentes números cuánticos, la simetría preserva los cruces exactos.

En la fig.3.1 consideramos el caso de propagación paralela a la polarización de la onda  $\theta = 0$ . Se comprueba que independientemente del valor de  $\lambda$  se mantienen de forma exacta los cruces correspondientes a la solución de la ec.(3.11), lo cual está de acuerdo con la solución exacta (3.6) que se obtiene cuando  $\theta = 0$ .

En las figs. 3.2 se compara  $\epsilon(\kappa)$  para la selección de dos ángulos  $\theta = \pi/4$  y  $\theta = \pi/2$  y diferentes valores de la constante de acoplamiento  $\lambda$ . Se observa que conforme aumenta el valor de la constante de acoplamiento se generan brechas que aparecen inicialmente en algunos de los cruces determinados por la ec.(3.11). Notamos que en ningún caso se generan brechas en el punto  $\kappa = 0$ , ya que en dicho punto se preservan los cruces exactos. En las figs. 3.2-(a) y 3.2-(b) correspondientes a  $\lambda = 0.2$  se generan las primeras brechas en el siguiente cruce  $\kappa = 1/2$ . Al aumentar la constante de acoplamiento a  $\lambda = 0.5$ , observamos claramente en el caso  $\theta = \pi/4$  fig. 3.2-(c), la aparición de cruces evitados en  $\kappa = 1/2, 1$ . Sin embargo para  $\theta = \pi/2$  fig. 3.2-(d) el cruce exacto correspondiente a  $\kappa = 1$  se mantiene, pero desplazado a  $\kappa = 0.9$ . Al incrementar la constante de acoplamiento a  $\lambda = 1$ , para  $\theta = \pi/4$  fig. 3.2-(e) observamos una nueva brecha en  $\kappa = 3/2$ . Mientras que para  $\theta = \pi/2$  fig. 3.2-(f) notamos que el segundo cruce se preserva, con un fuerte desplazamiento a  $\kappa \approx 0.6$ , y se abre la brecha correspondiente al cruce  $\kappa = 3/2$ , pero desplazado a  $\kappa \approx 1.25$ . Como veremos a continuación esta sucesión de brechas y cruces exactos se puede explicar utilizando un operador de paridad  $\hat{P}$ , el cual se puede definir para  $\theta = \pi/2$ .

Las propiedades anteriormente descritas para el espectro de las cuasienergías se pueden entender si analizamos las simetrías de la ecuación de evolución para la función periódica  $\bar{\phi}(\xi)$  que aparece de acuerdo al teorema de Floquet en la ec.(3.8). Al sustituir la función de onda de la ec.(3.8) en la ecuación de Dirac (3.3) obtenemos que  $\bar{\phi}(\xi)$  satisface la siguiente ecuación de eigenvalores para la cuasienergía

$$\left[ \sigma_1(\kappa_x + \lambda \sin \xi) + \sigma_2 \kappa_y - i \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \bar{\phi}(\xi) = \epsilon \bar{\phi}(\xi). \quad (3.13)$$

La cual representa una ecuación de eigenvalores en el espacio de funciones periódicas en la variable  $\xi$ :  $\bar{\phi}(\xi + 2\pi) = \bar{\phi}(\xi)$ . Para el caso en que  $\theta = 0$  ( $\kappa_y = 0$ ) vimos que la ecuación anterior tiene la solución exacta dada en la ec.(3.4) con el espectro determinado en la ec.(3.6). Consideremos ahora el caso  $\theta = \pi/2$ , la ecuación de eigenvalores para  $\bar{\phi}(\xi)$  está determinada por el hamiltoniano efectivo

$$\hat{\mathcal{H}}_F = \left[ \sigma_1 \lambda \sin \xi + \sigma_2 \kappa - i \frac{\partial}{\partial \xi} \right]. \quad (3.14)$$

Para este hamiltoniano es posible encontrar una simetría discreta, representada por un operador de Paridad que genera traslaciones temporales discretas

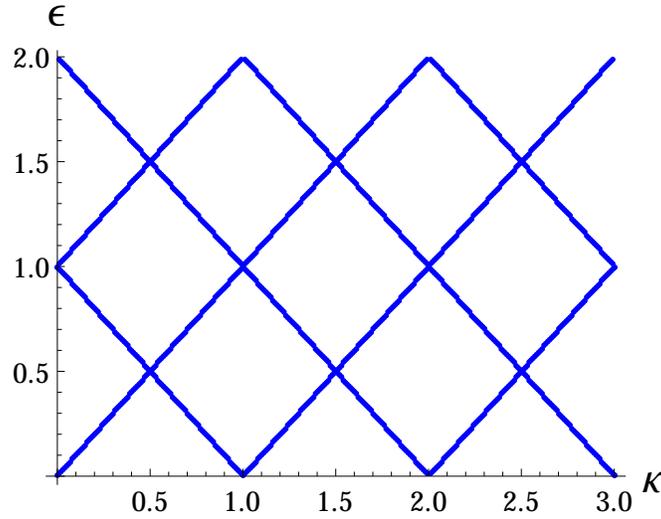


Figura 3.1: Espectro de cuasienergías  $\epsilon$  como función de la magnitud del momento  $\kappa$  para el caso de polarización lineal paralela al movimiento de los portadores de carga  $\theta = 0$ . El resultado obtenido es independiente de la selección de constante de acoplamiento  $\lambda$ , siempre y cuando se seleccione una matriz truncada de dimensión adecuada. Por ejemplo para  $\lambda \leq 3$  es suficiente seleccionar una matriz de dimensión  $21 \times 21$ , mientras que para  $\lambda = 10$  se requiere una matriz de dimensión  $41 \times 41$ .

de medio periodo. Para esto definimos el operador  $\hat{P}$  como [56]

$$\hat{P} = \sigma_2 e^{\frac{T}{2}\partial_\xi} = \sigma_2 e^{\pi\partial_\xi}, \quad (3.15)$$

donde tomamos en cuenta que el periodo es  $T = 2\pi$ . Si notamos que  $\hat{P} \sin \xi = \sin(\xi + \pi)\hat{P} = -\sin \xi \hat{P}$ , se ve de forma directa que en efecto  $\hat{P}$  representa una simetría del problema ya que conmuta con  $\hat{\mathcal{H}}_F$

$$\hat{P}\hat{\mathcal{H}}_F\hat{P}^{-1} = \hat{\mathcal{H}}_F. \quad (3.16)$$

El operador  $\hat{P}$  cumple la condición  $\hat{P}\hat{P} = \mathbf{1}$ , debido a que actúa en el espacio de funciones periódicas, por lo que sus valores propios son  $\pm 1$ . Corroborando con esto la interpretación de  $\hat{P}$  como un operador de paridad.

Consideremos ahora las soluciones exactas que se pueden obtener para la ecuación de eigenvalores  $\hat{\mathcal{H}}_F\bar{\phi}(\xi) = \epsilon\bar{\phi}(\xi)$  cuando se considera el límite  $\lambda \rightarrow 0$

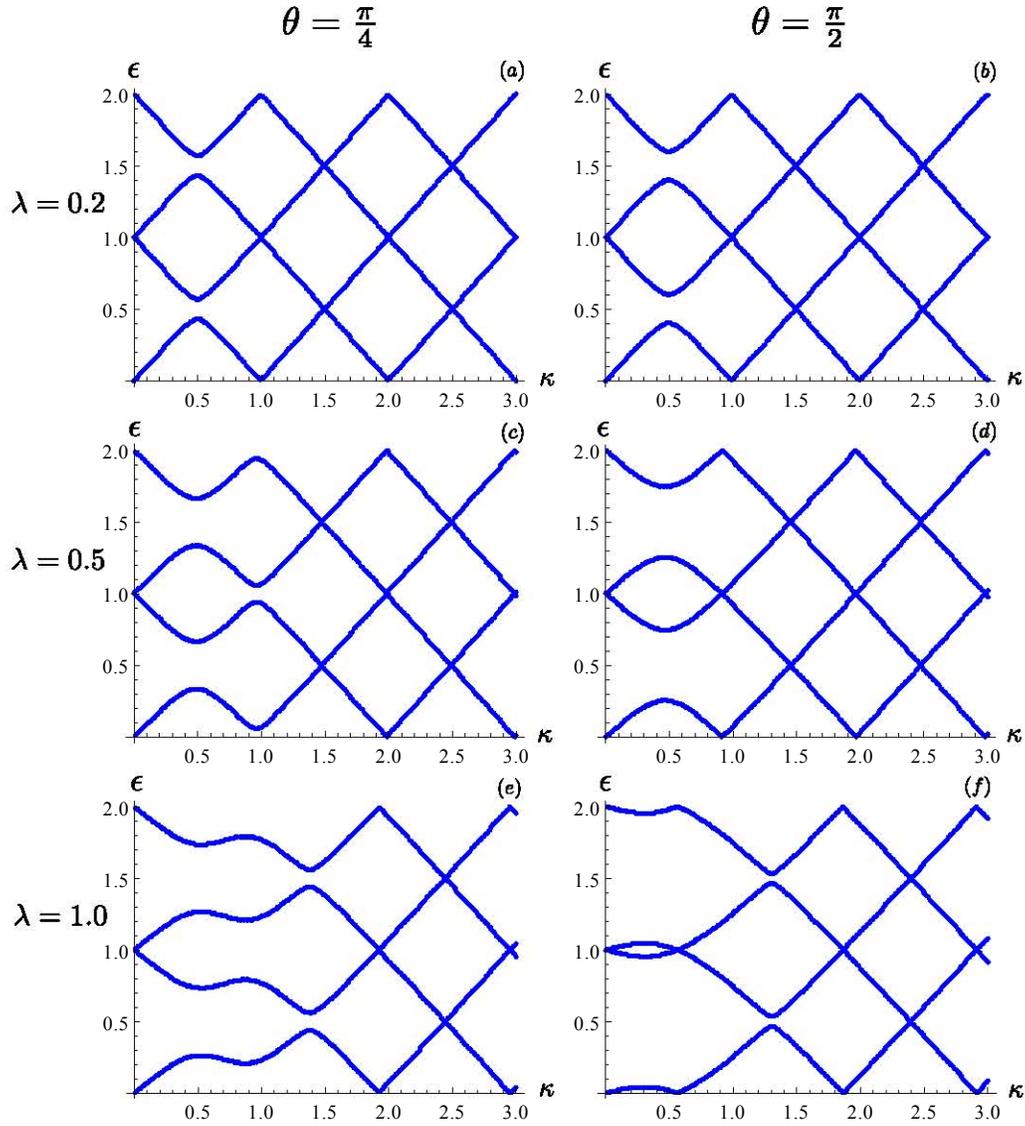


Figura 3.2: Espectro de cuasienergías  $\epsilon$  como función de la magnitud del momento  $\kappa$ , obtenido a partir de la diagonalización del hamiltoniano en la ec.(3.12) con una matriz truncada de dimensión  $21 \times 21$ . Los parámetros se seleccionan de acuerdo a: Columna izquierda  $\theta = \pi/4$ : (a)  $\lambda = 0.2$ , (c)  $\lambda = 0.5$  y (e)  $\lambda = 1$ . Columna derecha  $\theta = \pi/2$ : (b)  $\lambda = 0.2$ , (d)  $\lambda = 0.5$  y (f)  $\lambda = 1$ .

en la ec.(3.14). Es fácil comprobar que las cuasienergías y sus correspondientes eigenfunciones están dadas por

$$\epsilon_n^\pm = \pm\kappa + n, \quad \bar{\phi}(\xi)_n^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{in\xi} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Comprobamos que el espectro coincide con los resultados previamente obtenidos en la ec.(3.11). Se puede demostrar de forma directa que estos estados tienen paridades bien definidas con relación al operador  $\hat{P}$ , en efecto tenemos que

$$\hat{P}\bar{\phi}(\xi)_n^\pm = \pm(-1)^n \bar{\phi}(\xi)_n^\pm. \quad (3.18)$$

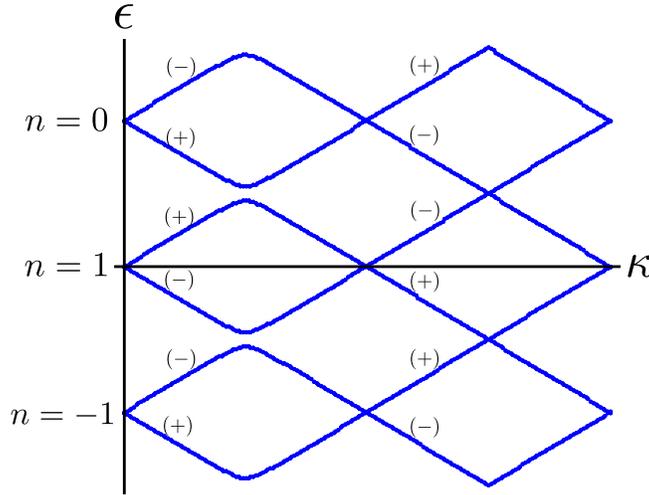


Figura 3.3: Gráfica cualitativa del espectro de pseudo-energía  $\epsilon$  como función de la magnitud del momento  $\kappa$ . Se considera  $\theta = \pi/2$  y  $\lambda = 0.1$ , además se etiquetan las paridades correspondientes.

Observamos que para un mismo valor del modo  $n$ , los estados correspondientes a las cuasienergías  $\epsilon_n^+ = +\kappa + n$  y  $\epsilon_n^- = -\kappa + n$  tienen paridades diferentes. Adicionalmente notamos que las paridades correspondientes a las ramas  $+\kappa$  y  $-\kappa$  se van alternando conforme se incrementa el valor de  $n$ . Dicha asignación de paridades se muestra en la Fig.(3.3), lo cual nos permite determinar los cruces de las energías no perturbadas  $\epsilon_n^+$  y  $\epsilon_m^-$  en los cuales su paridad coincide y por lo tanto podemos esperar que al incrementar el valor

de  $\lambda$  el efecto perturbativo de la interacción con el campo electromagnético genere una brecha. Por otro lado se identifican los cruces correspondiente a niveles con paridad diferentes, para los cuales podemos esperar que se preserven los cruces exactos. En particular tenemos que para  $\kappa = 0$  la paridad de los estados que se cruzan siempre difiere, lo cual explica por qué nunca se rompen los puntos de Dirac en  $\kappa = 0$ . Por otro lado en  $\kappa = 1/2$  los estados que se cruzan tienen paridades de signo contrario, por lo que al incrementar el valor de la constante de acoplamiento  $\lambda$  podemos esperar que se genere una brecha tal y como se observa en las figs. 3.2. Por otro lado en  $\kappa = 1$  tenemos nuevamente cruces de estados con paridad diferente por lo que podemos esperar, al menos perturbativamente, que al aumentar el valor de  $\lambda$ , los correspondientes conos de Dirac se puedan desplazar pero se preserven. Finalmente para  $\kappa = 3/2$  tenemos nuevamente el cruce de niveles con diferentes paridades, por lo que podemos esperar que el aumento de  $\lambda$  eventualmente genere una brecha. Lo anterior explica la alternancia de cruces y brechas observados para el caso  $\theta = \pi/2$  en las figs. 3.2-(b) 3.2-(d) y 3.2-(f).

### 3.1.3. Formalismo de Magnus-Floquet, corriente no-lineal

El uso del formalismo de Floquet y la correspondiente solución numérica de las ecuaciones de recurrencia (3.10), nos permite entender la estructura del espectro de cuasienergías del sistema correspondiente al grafeno irradiado con una onda electromagnética linealmente polarizada. A continuación veremos que el sistema también se puede analizar por medio del formalismo de Magnus-Floquet. Como una aplicación de esta metodología estudiaremos la corriente eléctrica inducida por la onda electromagnética en el sistema y los efectos no lineales, en particular la generación de efectos de tercer armónico. Presentaremos una estimación de la intensidad de la energía radiada por el grafeno, correspondientes al primer y tercer armónico.

Consideremos la ecuación (3.3), si aplicamos la transformación  $\Psi'(\xi) = S^\dagger \Psi(\xi)$ , donde la matriz de transformación  $S$  está dada por la ec.(2.7), obtenemos para nuestro sistema la siguiente ecuación de evolución

$$i\partial_\xi \Psi'(\xi) = H'(\xi)\Psi'(\xi) = \left[ \epsilon(\xi) \sigma_3 - \frac{1}{2} \dot{\varphi}(\xi) \sigma_1 \right] \Psi'(\xi), \quad (3.19)$$

donde  $\sigma_1, \sigma_3$  son las matrices de Pauli, las cantidades están expresadas en

términos de las variables adimensionales (3.2) y tenemos que

$$\epsilon(\xi) = \sqrt{(\kappa_x - \lambda \sin \xi)^2 + \kappa_y^2}, \quad \dot{\phi}(\xi) = \frac{\lambda \kappa_y \cos \xi}{\epsilon(\xi)^2}. \quad (3.20)$$

Consideramos el método de Magnus-Floquet (ver capítulo anterior), la solución de la ec.(3.19) se puede obtener a partir del operador de evolución  $U(\xi)$ . Es decir  $\Psi'(\xi) = U(\xi)\Psi(0)$ , con la condición inicial  $U(0) = 0$ . Tomando en cuenta que el hamiltoniano  $H'(\xi)$  es periódico, tenemos que de acuerdo al formalismo de Magnus-Floquet el operador de evolución tiene la forma ec.(2.30)

$$U(\xi) = e^{i\Lambda(\xi)} e^{i\xi F}, \quad (3.21)$$

donde  $\Lambda(\xi)$  es un matriz periódica  $\Lambda(\xi + 2\pi) = \Lambda(\xi)$ , mientras que  $F$  es una matriz constante, cuyos eigenvalores representan las cuasienergías del sistema. A primer orden en la expansión de Magnus-Floquet,  $F$  y  $\Lambda(\xi)$  se determinan de acuerdo a las siguientes expresiones [45]

$$F \approx F_1 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\xi' H(\xi'),$$

$$\Lambda(\xi) \approx \Lambda_1(\xi) = \int_0^\xi d\xi' H(\xi') - \xi F. \quad (3.22)$$

Tomando en cuenta que los eigenvalores de la matriz  $F$  determinan las cuasienergías del sistema, y utilizando las ecs. (3.19,3.22), obtenemos que las cuasienergías del sistema están dadas por

$$\epsilon(\kappa) = \pm \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(\xi) d\xi \pm n, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.23)$$

Observamos que al nivel de la aproximación usada, las cuasienergías están dadas por el promedio sobre un periodo de los eigenvalores instantáneos del hamiltoniano de la ec.(3.19).

Para calcular la corriente inducida en el sistema, consideraremos un acoplamiento débil  $\lambda \ll \kappa$ . Las dos matrices  $F$  y  $\Lambda(\xi)$  que aparecen en las exponenciales del operador de evolución ec.(3.21) se evalúan utilizando la ec.(3.22) hasta términos de orden  $\lambda$ , con lo cual obtenemos las siguientes expresiones

$$F \approx \kappa \sigma_3, \quad \Lambda(\xi) \approx Q(\xi) \sigma_1, \quad Q(\xi) = \frac{\lambda}{2\kappa} \sin \theta \sin \xi. \quad (3.24)$$

Utilizando las ecs. (3.21,3.22,3.24) obtenemos una expresión explícita para el operador de evolución. Seleccionando el estado inicial  $\Psi'(0) = (1, 0)^T$ , obtenemos la evolución del sistema de acuerdo a

$$\Psi'(\xi) = e^{-i\kappa\xi} \begin{pmatrix} \cos Q(\xi) \\ i \sin Q(\xi) \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

Para calcular la corriente eléctrica inducida por la onda electromagnética, sustituimos la función de onda ec.(3.25) en las expresiones para la corriente de polarización ec.(2.21) y corriente de conducción ec.(2.19), obteniendo :

$$\begin{aligned} \langle j'_x(\xi) \rangle_{pol} &= ev_F \sin \theta \sin [2Q(\xi)] , \\ \langle j'_x(\xi) \rangle_{cond} &= ev_F \frac{(\kappa \cos \theta - \lambda \sin \xi)}{\kappa} \cos [2Q(\xi)] . \end{aligned} \quad (3.26)$$

En las ecuaciones anteriores utilizamos el hecho de que  $\sin \varphi \approx \sin \theta$  y  $\cos \varphi \approx (\kappa \cos \theta - \lambda \sin \xi) / \kappa$ . Las expresiones en la ec.(3.26) representan las corrientes inducidas para un valor específico del momento  $\kappa$  y una orientación  $\theta$ . La corriente promedio se obtiene integrando sobre los momentos, suponemos el límite de temperatura cero en el cual los momentos están distribuidos uniformemente en una región limitada por la energía de Fermi. Tomando en cuenta lo anterior tenemos que la corriente promedio está dada por la expresión (ver ec.(2.63))

$$J_x(\xi) = g \int \frac{d^2p}{(2\pi\hbar)^2} \theta(p_F - p) \langle j'_x(\xi) \rangle = \frac{\omega^2}{\pi^2 v_F^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\kappa_F} \kappa \langle j'_x(\xi) \rangle d\kappa. \quad (3.27)$$

Donde se utilizó la ec.(3.2) para escribir la integral en términos de variables adimensionales,  $\theta(p_F - p)$  es la función escalón y  $g = 4$  es el factor de degeneración de valle y espín. Hacemos notar que no hemos escrito la componente perpendicular a la dirección del campo eléctrico, ya que obviamente se cancela al integrar sobre los momentos.

La corriente promedio correspondiente a las contribuciones de polarización y conducción se puede evaluar explícitamente en una serie de potencias del parámetro  $\tilde{\lambda} = \lambda/\kappa_F$  al sustituir las expresiones de la ec.(3.26) en la ec.(3.27). El método utilizado es similar al de la referencia [54] y se describe en detalle en el apéndice. De acuerdo a las ecs. (3.26) las corrientes promedio de polarización y de conducción son del mismo orden de magnitud, por lo

cual conviene referirse solamente al valor total de la corriente que se obtiene al sumar las dos contribuciones,  $J_x(t) = J_x^{cond}(t) + J_x^{pol}(t)$ . A orden  $\tilde{\lambda}^3$  el resultado es el siguiente ecs. (B.17)

$$J_x(t) = ev_F n_F \left\{ \tilde{\lambda} \sin(\omega t) \left( 1 + \frac{9}{32} \tilde{\lambda}^2 \right) - \frac{3}{32} \tilde{\lambda}^3 \sin(3\omega t) + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^5) \right\}. \quad (3.28)$$

En esta ecuación la densidad de Fermi  $n_F$  y el parámetro  $\tilde{\lambda}$  están dados como

$$n_F = \frac{1}{\pi} \left( \frac{E_F}{\hbar v_F} \right)^2, \quad \tilde{\lambda} = \frac{\lambda}{\kappa_F} = \frac{v_F e E_0}{\omega E_F}. \quad (3.29)$$

Tomando en cuenta que  $\tilde{\lambda}$  es proporcional a la intensidad del campo eléctrico  $E_0$ , la ec.(3.28) muestra que además del término lineal, aparecen términos no-lineales con potencias impares del campo eléctrico  $E_0^n$ ,  $n = 3, 5, \dots$ . Resaltamos que en correspondencia a cada término de orden  $E_0^n$  la frecuencia es  $n\omega$  con  $n$  impar. Es decir el grafeno irradiado por una onda electromagnética genera radiación con armónicos impares de orden superior. El estudio de materiales no-lineales que puedan generar de forma eficiente armónicos de orden superior es un campo de gran interés y actualidad en áreas diversas que incluyen por ejemplo las radio-comunicaciones, la óptica cuántica, la producción de fuentes en el rango de terahertz, entre otros.

La expresión para la corriente en la ec.(3.28) se puede representar en términos de las conductividades de orden uno  $\sigma^{(1)}$  y orden tres  $\sigma^{(3)}$ , si identificamos la respuesta del sistema de acuerdo a la expresión

$$J_x(t) = \sigma^{(1)} E_x(\omega t) + \sigma^{(3)} E_x^3(\omega t). \quad (3.30)$$

Tomando en cuenta que la expresión para el campo eléctrico en la ec.(3.1) se puede interpretar como la parte real del campo  $E_x = E_0 e^{i\omega t}$ , tenemos que en notación compleja la ec.(3.28) se obtiene de la parte imaginaria de la ec.(3.30), en la cual las conductividades  $\sigma^{(1)}$  y  $\sigma^{(3)}$  son cantidades imaginarias que están dadas por las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} \sigma^{(1)} &= i \frac{e^2}{\pi \hbar} \left( \frac{E_F}{\hbar \omega} \right) \left( 1 + \frac{9}{32} \left( \frac{v_F e E_0}{\omega E_F} \right)^2 \right), \\ \sigma^{(3)} &= i \frac{3}{32} \frac{e^4 \hbar v_F^2}{\pi E_F^4} \left( \frac{E_F}{\hbar \omega} \right)^3. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Hacemos notar que si despreciamos la contribución de orden  $\tilde{\lambda}^3$ , la expresión anterior para  $\sigma^{(1)}$  coincide con el resultado bien conocido para la parte imaginaria de la conductividad intrabanda tipo Drude, que se obtiene a partir de conductividad óptica en el límite  $k_B T \ll E_F$  [65, 66, 67, 68].

A continuación calculamos el campo de radiación generado por la corriente  $J_x(t)$ . Para ello escribimos las contribuciones del primer y segundo armónico a la corriente como

$$J_x^{(n)}(t) = \sigma^{(n)} E_0^n \sin(n\omega) \delta(z) \quad n = 1, 3, \quad (3.32)$$

donde las conductividades de primer y tercer orden  $\sigma^{(n)}$   $n = 1, 3$ , están dadas por las ecs. (3.31). Suponemos que el grafeno ocupa una superficie muy grande, de lado  $L \times L$ , localizada en el plano  $z = 0$ . La condición de que la superficie sea muy grande, requiere que  $L$  sea mucho mayor que la longitud de onda de la radiación incidente. Es decir se debe cumplir la restricción  $2\pi c/\omega \ll L$ . En puntos de observación cercanos al grafeno, suficientemente alejados de las orillas del plano ( $z \ll L$ ) los campos electromagnéticos de radiación corresponden a los de una onda plana que se propaga alejándose de la superficie del grafeno en las direcciones  $\hat{e}_z$  y  $-\hat{e}_z$ . Es fácil comprobar que los campos eléctrico  $\mathcal{E}^{(n)}$  y magnético  $\mathcal{B}^{(n)}$  de la onda radiada se pueden seleccionar de la siguiente forma

$$\mathcal{B}_y^{(n)} = \mathcal{B}_0^{(n)} \sin\left(\omega^{(n)}\left(t - \frac{z}{c}\right)\right), \quad \mathcal{E}_x^{(n)} = c \mathcal{B}_0^{(n)} \sin\left(\omega^{(n)}\left(t - \frac{z}{c}\right)\right), \quad (3.33)$$

La intensidad relativa entre los campos se ajustó de tal manera que se satisface la ley de Faraday. El valor de  $\mathcal{B}_0^{(n)}$  se determina integrando la ley de Ampère a lo largo del circuito rectangular mostrado en la figura (fig. 3.4).

El rectángulo tiene lados de longitud  $l$ ,  $l \ll L$ , paralelos al campo magnético (eje ‘ $y$ ’) y los otros lados de longitud  $2z$  perpendiculares al plano del grafeno. Para puntos muy cercanos a la placa,  $z \rightarrow 0$ , obtenemos los siguientes resultados

$$\mathcal{B}_0^{(n)} = \frac{\mu_0 \sigma^{(n)}}{2} E_0^n, \quad \omega^{(n)} = n\omega, \quad (3.34)$$

los cuales relacionan la amplitud de la onda radiada con la amplitud de la onda incidente y el valor de las conductividades correspondientes al primer ( $n = 1$ ) o tercer ( $n = 3$ ) armónico.

A partir de las expresiones en las ecs. (3.33,3.34), podemos calcular el vector de Poynting  $\mathcal{S}^{(n)} = \hat{e}_z \frac{1}{\mu_0} \mathcal{B}_y^{(n)} \mathcal{E}_x^{(n)}$  de la onda radiada y considerando

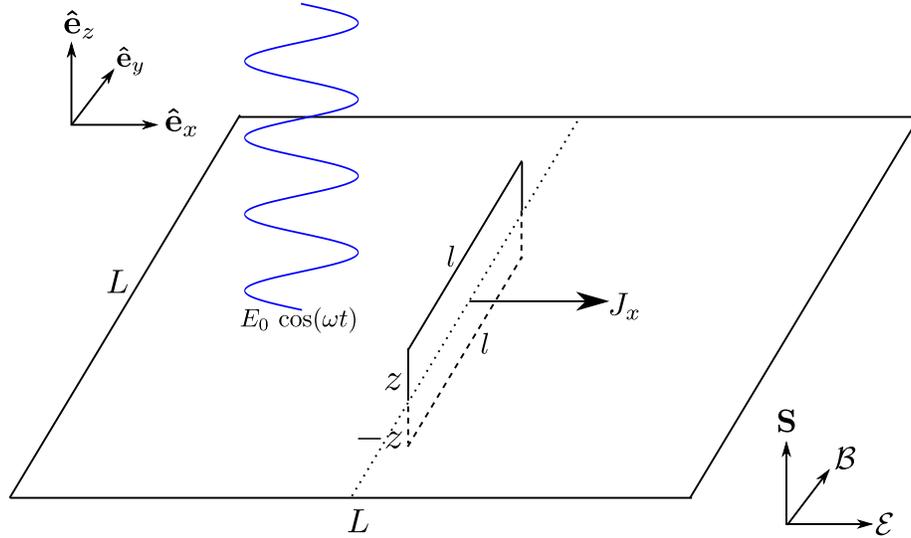


Figura 3.4: Esquema del circuito utilizado para determinar los campos de radiación.

el promedio temporal obtenemos la intensidad de la energía radiada  $I_{n\omega} = \hat{e}_z \cdot \langle \mathbf{S}^{(n)} \rangle$  correspondiente al primer  $n = 1$  y tercer  $n = 3$  armónico. Los resultados relativos a la intensidad  $I_0$  de la onda incidente son los siguientes

$$\begin{aligned} \frac{I_{1\omega}}{I_0} &= \frac{4\pi\alpha^2 v_F^2 n_F}{\omega^2} \left[ 1 + \frac{9\alpha}{4n_F \hbar \omega^2} I_0 \right]^2, \\ \frac{I_{3\omega}}{I_0} &= \frac{3\pi}{4n_F} \left[ \frac{v_F \alpha^2}{\hbar \omega^3} I_0 \right]^2 \equiv \left[ \frac{I_0}{I_F} \left( \frac{E_F}{\hbar \omega} \right)^3 \right]^2, \end{aligned} \quad (3.35)$$

donde  $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0 \hbar c)$  es la constante de estructura fina,  $I_0$  es la intensidad de la onda incidente y definimos las intensidad de Fermi  $I_F$  de acuerdo a

$$I_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E_0^2, \quad I_F = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \frac{\hbar \omega_F^2 n_F^2}{\alpha^2}. \quad (3.36)$$

Los resultados anteriores muestran que es de esperarse que una capa de grafeno funcione como un material multiplicador de frecuencias, triplicando la señal original:  $\omega \rightarrow 3\omega$ . Resultados similares a los de las ecs. (3.28,3.31) se

obtuvieron en la referencia [53] utilizando un método semi-clásico basado en la ecuación de Boltzman y en la referencia [54, 55] en la que se hizo un tratamiento cuántico resolviendo la ecuación bidimensional de Dirac acoplada al campo electromagnético. El método usado en [54, 55] se basa en la aplicación de una transformación unitaria combinada con el uso de una función de prueba. En nuestro caso la solución se obtuvo con la aplicación del formalismo de Magnus-Floquet. Adicionalmente se calcularon explícitamente los campos de radiación producidos por la corriente inducida en el grafeno ecs. (3.33,3.34), lo cual permite estimar la intensidad de la radiación emitida en el tercer armónico ecs. (3.35). Hacemos notar que se ha comprobado experimentalmente la capacidad que tiene el grafeno para multiplicar la frecuencia de la señal aplicada [69]. Sin embargo en el experimento la señal se aplica, no irradiando al material, sino a través del estímulo de una diferencia de potencial oscilatoria. Observándose en ese caso una respuesta que duplica la frecuencia de la señal original.

Las ecs. (3.35) nos permiten estimar la intensidad de la respuesta del grafeno a través de la radiación saliente, en las contribuciones del primer y tercer armónico. En particular si consideramos que la intensidad relativa del tercer armónico respecto a  $I_0$  es mayor a una fracción  $f$ , es decir  $I_{3\omega}/I_0 > f$ , de acuerdo a la ec.(3.35) obtenemos que la intensidad de la radiación incidente debe cumplir la siguiente condición

$$I_0 > \sqrt{f} I_F \left( \frac{\hbar\omega}{E_F} \right)^3, \quad f = \frac{I_{3\omega}}{I_0}. \quad (3.37)$$

Observamos que conforme aumenta la frecuencia de la radiación incidente, crece la intensidad mínima requerida para poder obtener una fracción observable del efecto de tercer armónico. Para hacer una estimación suponemos un valor de la densidad de Fermi de  $n_F = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ , que corresponde a un valor de  $I_F = 7 \text{ KW/cm}^2$ . Con lo cual encontramos que para obtener una respuesta  $f = I_{3\omega}/I_0 \sim 0.001$ : (A) en la región de microondas, suponiendo  $\omega = 10 \text{ GHz}$  se requiere una intensidad de la onda incidente superior a  $I_0 \sim 0.05 \text{ mW/cm}^2$ , con lo cual se obtiene una respuesta del orden  $I_{3\omega} \sim 0.05 \text{ }\mu\text{W/cm}^2$ . (B) En el caso del infrarrojo medio,  $\omega = 6 \text{ THz}$ , la intensidad umbral es de  $I_0 \sim 9 \text{ KW/cm}^2$  correspondiente al valor  $I_{3\omega} \sim 9 \text{ W/cm}^2$ . (C) Mientras que en el visible,  $\omega = 500 \text{ THz}$ , se requiere una intensidad de  $I_0 \sim 5 \text{ GW/cm}^2$ , para producir un armónico de tercer orden con una intensidad  $I_{3\omega} \sim 5 \text{ MW/cm}^2$ .

El formalismo anterior nos permite estimar la intensidad de la respuesta del tercer armónico para diferentes frecuencias de la radiación incidente. Sin embargo para obtener una predicción más precisa, se requiere un tratamiento que revise con detalle varias de las aproximaciones utilizadas. (1) Los resultados son válidos cuando los efectos no-lineales no son muy intensos, ya que consideramos  $\tilde{\lambda} < 1$ , ec.(3.29). Considerando las ecs. (3.29,3.37) vemos que la aproximación es menos precisa conforme se incrementa la frecuencia de la radiación incidente. (2) En el cálculo de la radiación se supuso una muestra muy grande de grafeno. Un cálculo numérico preciso sería requerido para tomar en cuenta los efectos del tamaño finito de la muestra. (3) La ec.(3.27) considera solamente los efectos de las transiciones intra-banda, en el régimen de frecuencias que cumplen la condición  $\hbar\omega > 2E_F$ , se deben agregar los efectos de las transiciones inter-banda.

## 3.2. Polarización circular

Consideramos ahora el caso del grafeno irradiado por una onda electromagnética con polarización circular. Como veremos aparecen diferencias importantes con respecto al caso de polarización lineal. En particular encontraremos que el espectro de cuasienergías muestra la aparición de brechas en los puntos de Dirac como resultado de la irradiación con ondas electromagnéticas polarizadas circularmente. En este caso el campo eléctrico y el potencial vectorial están dados por las siguientes expresiones

$$\mathbf{E} = E_0 (\cos(\omega t), \sin(\omega t)) , \quad \mathbf{A} = \frac{E_0}{\omega} (-\sin(\omega t), \cos(\omega t)) . \quad (3.38)$$

Utilizando las cantidades adimensionales definidas en las ecs. (3.2) tenemos que la ecuación de evolución del sistema es la siguiente

$$i \frac{\partial \Psi(\xi)}{\partial \xi} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa e^{-i\theta} - i\lambda e^{-i\xi} \\ \kappa e^{i\theta} + i\lambda e^{i\xi} & 0 \end{pmatrix} \Psi(\xi) , \quad (3.39)$$

donde  $\theta$  determina la orientación del momento lineal de los portadores de carga  $\boldsymbol{\kappa} = \kappa(\cos \theta, \sin \theta)$ . Es conveniente realizar la siguiente transformación  $\Psi'(\xi) = \exp \{i\sigma_3(\omega - \xi)/2\} \Psi(\xi)$ , con lo cual la ecuación de evolución toma la siguiente forma

$$i \frac{\partial \Psi'(\xi)}{\partial \xi} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \kappa e^{i\xi} - i\lambda \\ \kappa e^{-i\xi} + i\lambda & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \Psi'(\xi) , \quad (3.40)$$

donde redefinimos sin pérdida de generalidad la constante de acoplamiento  $\lambda e^{i\theta} \rightarrow \lambda$ . En la ec.(3.40) observamos que en el punto de Dirac el hamiltoniano se vuelve independiente del tiempo y por lo tanto, en  $\kappa = 0$  la ec.(3.40) tiene una solución exacta. En términos de la función de onda original  $\Psi(\xi)$ , es fácil comprobar que la solución se puede escribir como

$$\Psi(\xi) = \exp \{i (1/2 \pm \Omega') \xi\} \begin{pmatrix} e^{-i\xi} \\ i \left( \frac{\Omega' \pm 1/2}{\lambda} \right) \end{pmatrix}, \quad \Omega' = \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda^2}, \quad (3.41)$$

donde identificamos la expresión para  $\Omega'$  como la frecuencia (adimensional) de Rabi [70]. Insertando unidades, la frecuencia de Rabi  $\Omega$  toma la siguiente forma

$$\Omega = \sqrt{\frac{\omega^2}{4} + \left( \frac{ev_F E_0}{\hbar\omega} \right)^2}. \quad (3.42)$$

Lo anterior corresponde al resultado bien conocido de Rabi [64, 70], quien mostró que un sistema de dos niveles excitado por una onda electromagnética polarizada circularmente tiene una solución exacta.

La solución en la ec.(3.41) es consistente con el teorema de Floquet [45, 63, 64], ya que la función de onda es de la forma  $\Psi(\xi) = \exp(i \epsilon \xi) \bar{\Psi}(\xi)$  donde  $\epsilon$  es la cuasienergía y  $\bar{\Psi}(\xi)$  es una función periódica  $\bar{\Psi}(\xi + 2\pi) = \bar{\Psi}(\xi)$ . Esto nos permite identificar el valor de la cuasienergía en el punto de Dirac como

$$\epsilon_n^\pm(\kappa = 0) = \frac{1}{2} \pm \Omega' + n \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (3.43)$$

donde se utilizó el hecho de que la energía (adimensional) está definida módulo  $n$ . Como este es un resultado exacto, podemos concluir que en el punto de Dirac la irradiación con una onda polarizada circularmente produce una brecha  $\Delta$  entre los niveles de energía positiva y negativa cuya magnitud está dada por

$$\Delta = 2\epsilon(\kappa = 0) = 2\Omega' = 2\sqrt{\frac{1}{4} + \lambda^2}. \quad (3.44)$$

Para estudiar el espectro de cuasienergías en el caso general, valores arbitrarios de  $\kappa$ , utilizamos el teorema de Floquet que nos permite expresar la función de onda que aparece en la ec.(3.40) como

$$\Psi'(\xi) = e^{i\epsilon(\kappa)\xi} \bar{\Psi}(\xi), \quad \bar{\Psi}(\xi + 2\pi) = \bar{\Psi}(\xi). \quad (3.45)$$

donde  $\bar{\Psi}(\xi)$  es una función periódica y  $\epsilon(\kappa)$  representan la cuasienergía del sistema. La periodicidad del espinor  $\bar{\Psi}$  nos permite expresar cada una de sus componentes en una expansión de Fourier, es decir

$$\bar{\Psi}(\xi) = \begin{pmatrix} f(\xi) \\ g(\xi) \end{pmatrix}, \quad f(\xi) = \sum_n f_n e^{in\xi}, \quad g(\xi) = \sum_n g_n e^{in\xi}, \quad (3.46)$$

donde la suma es sobre valores enteros de  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Sustituyendo estas ecuaciones en la ec.(3.40) obtenemos las siguientes ecuaciones de recurrencia para los coeficientes de las funciones  $f$  y  $g$ :

$$\begin{aligned} \kappa g_n + (\epsilon - n)f_n - i\lambda g_{n+1} &= 0 \\ i\lambda f_{n-1} + (\epsilon - n)g_n + \kappa f_n &= 0. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Estas ecuaciones nos permiten corroborar que los valores de las cuasienergías quedan determinados módulo  $n$ . Y además comprobamos que en el punto de Dirac,  $\kappa = 0$ , la solución coincide con el resultado de la ec.(3.43). Por otro lado, en el límite de acoplamiento nulo,  $\lambda = 0$ , las ecs. (3.47) tienen como solución el espectro

$$\epsilon_n^{(\pm)} = \pm \kappa + n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3... \quad (3.48)$$

correspondiente al espectro de una serie de conos de Dirac con cruces exactos en los puntos  $(\epsilon, \kappa) = (n, m)$  y  $(\epsilon, \kappa) = (n + 1/2, m + 1/2)$ , donde  $n$  y  $m$  son números enteros. De manera similar al caso de polarización lineal, nos interesa analizar el efecto de la interacción electromagnética sobre dichos cruces y la posible generación de brechas de energía. Para ello utilizamos los coeficientes  $f_n$  y  $g_n$  en la ec.(3.47) para definir un vector de dimensión infinita  $\Phi^T \equiv (\dots, g_{-1}, f_{-1}, g_0, f_0, g_1, f_1, \dots)$  donde  $\Phi_0 = g_0$ . Esto nos permite escribir las relaciones de recurrencia (3.47) como una ecuación de eigenvalores  $\mathcal{M}\Phi = \epsilon(\kappa)\Phi$ , donde la matriz  $\mathcal{M}$  está dada como

$$\mathcal{M} = \begin{bmatrix} \ddots & \vdots \\ \dots & i\lambda & -1 & \kappa & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & \kappa & -1 & -i\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & i\lambda & 0 & \kappa & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & \kappa & 0 & -i\lambda & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & i\lambda & +1 & \kappa & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \kappa & +1 & -i\lambda & \dots \\ & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

Encontramos que esta es una matriz tridiagonal infinita, la cual es independiente de la dirección del momento. Por lo tanto la cuasienergía depende solamente del parámetro  $\lambda$  y la magnitud del momento  $\kappa$  y se puede determinar numéricamente al resolver el problema de eigenvalores correspondiente al seleccionar una matriz truncada de dimensión  $N \times N$ , seleccionando  $N$  suficientemente grande para asegurar la convergencia de los resultados.

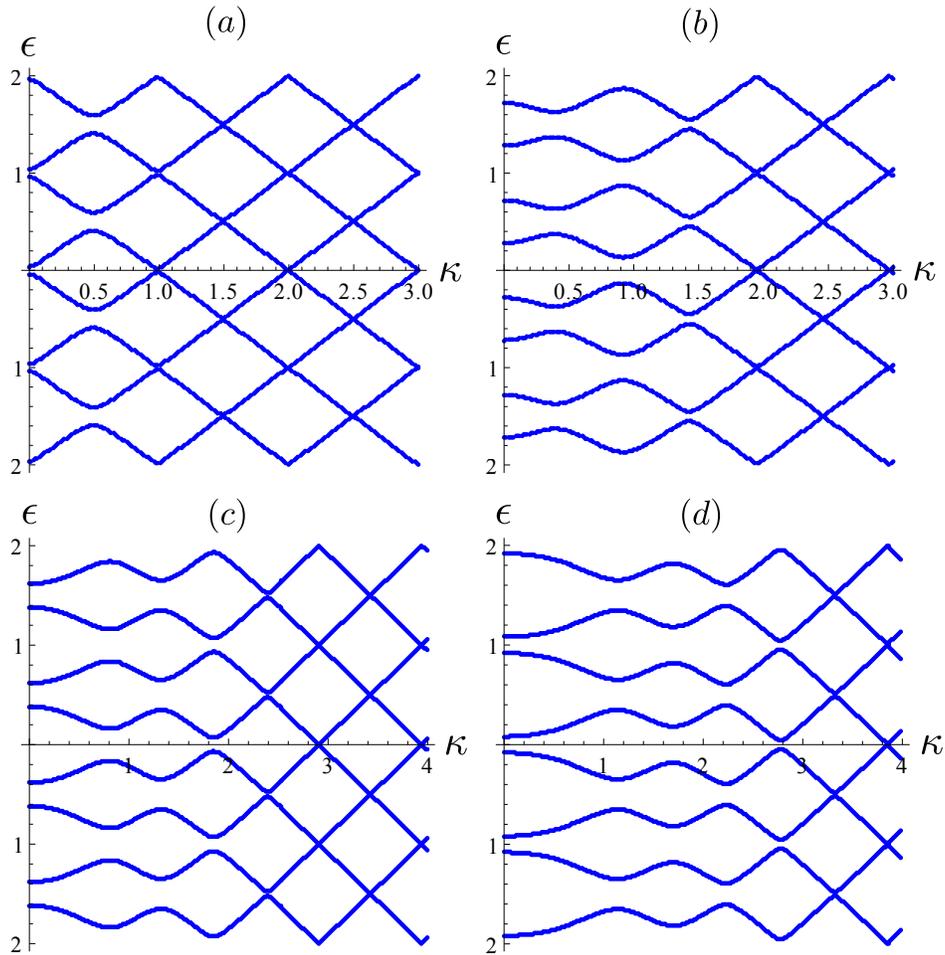


Figura 3.5: Cuasienergías en función de la magnitud del momento lineal  $\epsilon(\kappa)$ . Se ha utilizado una matriz de  $40 \times 40$  y para el parámetro  $\lambda$  los siguientes valores: (a)  $\lambda = 0.2$ , (b)  $\lambda = 0.6$ , (c)  $\lambda = 1$ , (d)  $\lambda = 1.5$ .

En las figuras 3.5 se muestra la relación de dispersión  $\epsilon(\kappa)$  para diferen-

tes valores de la constante de acoplamiento  $\lambda$ . La matriz en la ec.(3.49) se selecciona de dimensión adecuada para obtener convergencia de los resultados mostrados en las gráficas. Los resultados se pueden entender a partir del efecto que produce el acoplamiento  $\lambda$  finito sobre las expresiones (3.48) que se obtienen para  $\lambda = 0$ . En el límite  $\lambda \rightarrow 0$  el espectro consiste de una serie de réplicas de conos de Dirac cuyos vértices coinciden con los cruces de las soluciones  $\epsilon_n^+$  y  $\epsilon_m^-$ , localizados en  $\kappa = \frac{1}{2}(m - n)$ . Sin embargo para polarización circular el efecto de un acoplamiento finito  $\lambda$  siempre produce una brecha en los puntos de Dirac  $\kappa = 0$ , la cual es consistente con la ec.(3.44). Adicionalmente observamos que conforme aumenta el valor del acoplamiento  $\lambda$  se abren sucesivamente brechas en los siguientes puntos de cruce. Por ejemplo en las figuras 3.5: (a)  $\lambda = 0.2$  se observan brechas en  $\kappa = 0, 1/2$ . (b) Mientras que para  $\lambda = 0.6$  aparecen brechas en  $\kappa = 0, 1/2, 1, 3/2$ . (c) Para  $\lambda = 1$  se han abierto brechas hasta  $\kappa = 2$ , el punto de acercamiento se ha corrido a  $\kappa \approx 1.85$ . En este caso observamos que la brecha en  $\kappa = 0$  se ha ampliado tanto que en esa región los niveles se acercan a los de la siguiente banda. Finalmente en  $\lambda = 1.5$  se observan brechas abiertas hasta  $\kappa = 3$ , el punto de acercamiento se ha corrido a  $\kappa \approx 2.8$ . Observamos que cerca de  $\kappa \approx 0$  los niveles se han acercado nuevamente al punto original de Dirac. En conclusión para polarización circular, a diferencia de la lineal, no observamos que se preserven los cruces exactos. Esto se puede entender al analizar el hamiltoniano en la ec.(3.39) o ec.(3.40), para el cual no es posible definir una simetría de paridad similar a la de la ec.(3.15), que proteja los cruces exactos.

Lo presentado anteriormente corrobora el resultado [57, 62], de que la radiación polarizada circularmente induce una brecha en el espectro de la cuasienergía cerca del punto de Dirac, la cual se puede interpretar como la generación de una masa efectiva para los portadores de carga del grafeno. En el próximo capítulo estudiaremos en detalle la interacción del grafeno con un campo electromagnético cuantizado. Encontraremos que los efectos anteriores se pueden interpretar como una cuasipartícula masiva electrón-fotón que se forma como resultado del acoplamiento entre los portadores de carga con los fotones.

## Capítulo 4

# Grafeno en interacción con un campo electromagnético cuantizado

En los capítulos anteriores estudiamos la interacción de la radiación electromagnética con fermiones de masa nula, los cuales representan a los portadores de carga del grafeno. En dicho estudio consideramos que el campo de radiación es clásico, lo cual es una suposición válida en muchos casos de interés. Sin embargo resulta interesante considerar el caso en el que el campo de radiación está cuantizado.

Los estudios de óptica cuántica han demostrado que al considerar el carácter cuántico del campo de radiación permite estudiar y entender fenómenos novedosos de la interacción de los átomos con la radiación que no son explicados por el formalismo semiclásico. Esto sucede aun en el caso de un modelo sencillo, el modelo de Jaynes-Cummings (JC) en el cual se considera un átomo idealizado por un sistema de dos niveles en interacción con un campo de radiación monocromático cuántico. El modelo de JC permite explicar la emisión espontánea, así como los fenómenos de oscilaciones con colapsos y resurgimientos.

En este capítulo estudiaremos la interacción de los portadores de carga del grafeno con un campo de radiación cuantizado, mostraremos que el sistema se puede representar por un hamiltoniano que es una extensión del modelo de Jaynes-Cummings, y analizaremos sus propiedades. Encontraremos que los fotones en interacción con los portadores de carga del grafeno forman estados ligados que representan cuasipartículas masivas cargadas. Como resultado de

lo anterior se genera en el grafeno una brecha entre las bandas de valencia y conducción. Posteriormente estudiaremos la evolución temporal de paquetes de onda, lo cual da lugar a oscilaciones de Rabi, así como a fenómenos de colapsos y resurgimientos (*collapses and revivals*), que aparecen en observables del sistema.

## 4.1. Hamiltoniano fotón-grafeno y cantidades conservadas

La cuantización del campo electromagnético se puede incorporar sustituyendo las amplitudes que aparecen en la solución de las ecuaciones de Maxwell para el potencial vectorial ( $a(k)$  y  $a^*(k)$ ) por operadores de aniquilación y creación  $a_k$  y  $a_k^\dagger$ . En el caso de una onda monocromática sólo contribuye un modo con operadores de aniquilación y creación  $a$  y  $a^\dagger$ , por lo que el potencial vectorial para una onda circularmente polarizada se puede escribir de la siguiente forma [39]

$$\mathbf{A} = \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega V}} (\mathbf{e}_+ a + \mathbf{e}_- a^\dagger), \quad (4.1)$$

donde  $\omega$  es la frecuencia de la onda electromagnética,  $V$  es el volumen efectivo que ocupa la radiación y los vectores de polarización correspondientes a la polarización circular son  $\mathbf{e}_\pm = (\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2}$ , donde  $\mathbf{e}_{x,y}$  son vectores unitarios a lo largo de los ejes  $x, y$ .

En la ec.(4.1) no existe dependencia espacial ya que  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \equiv 1$ , debido a que consideramos que el vector de onda  $\mathbf{k}$  es perpendicular al plano definido por la muestra de grafeno, la cual se localiza en  $z = 0$ . Los operadores de aniquilación y creación  $a$  y  $a^\dagger$  obedecen la regla de conmutación usual  $[a, a^\dagger] = 1$ , y actúan sobre los estados de número del campo electromagnético  $|n\rangle$  de acuerdo a:  $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$  y  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ .

La interacción del fermión de Dirac con el campo de radiación se obtiene a partir del hamiltoniano para el grafeno

$$H_G = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}, \quad (4.2)$$

utilizando el principio de acoplamiento mínimo:  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$ , y sustituyendo para el potencial vectorial la expresión dada en la ec.(4.1). Adicionalmente se incluye la contribución de la energía del campo electromagnético

$H_\omega = \hbar\omega a^\dagger a$ , con lo cual el hamiltoniano efectivo del sistema (fermión-fotón) está dado por la siguiente expresión

$$H = \hbar\omega a^\dagger a + v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + \hbar g(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger), \quad (4.3)$$

donde  $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$  son las matrices de ascenso y descenso que actúan sobre las componentes del pseudoespín, y la constante de acoplamiento electrón-fotón  $g$  se define como

$$g = \sqrt{\frac{2\pi e^2 v_F^2}{\hbar\omega V}}. \quad (4.4)$$

En el hamiltoniano completo ec.(4.3) el primer y segundo término ( $H_\omega$  y  $H_G$ ) describen la dinámica del fotón y del fermión en ausencia de interacciones, mientras que el hamiltoniano de interacción

$$H_{int} = \hbar g(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger), \quad (4.5)$$

incluye la interacción fotón-electrón; frecuentemente y por simplicidad nos referiremos al electrón para representar al fermión de Dirac cuyos grados de libertad incluyen las soluciones de electrones y huecos. El término  $\sigma_+ a$  representa la absorción de un fotón acompañada de un salto del electrón de la subred  $B$  a la subred  $A$ . Mientras que  $\sigma_- a^\dagger$  describe un proceso en el que el electrón salta de la subred  $A$  a la subred  $B$  con la emisión de un fotón.

Observamos que en el punto de Dirac  $\mathbf{p} = 0$ , el hamiltoniano ec.(4.3) se reduce al modelo de Jaynes-Cummings [71], por lo cual en este límite el sistema tiene una solución exacta. La existencia de una solución exacta para el modelo de JC se relaciona con la existencia de cantidades conservadas. Para el modelo de JC se encuentra que se pueden definir dos operadores que representan cantidades conservadas [72]:

$$\begin{aligned} \hat{N}_{JC} &= a^\dagger a + \frac{1}{2}\sigma_z, \\ \hat{K}_{JC} &= g(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger) - \frac{1}{2}\omega\sigma_z. \end{aligned} \quad (4.6)$$

En efecto, podemos comprobar que  $\hat{N}_{JC}$  y  $\hat{K}_{JC}$  conmutan con el hamiltoniano ec.(4.3) en el punto de Dirac  $\mathbf{p} = 0$ . La pregunta que surge es ¿se puede extender la definición de los operadores  $\hat{N}_{JC}$  y  $\hat{K}_{JC}$  de tal forma que tengamos cantidades conservadas para nuestro modelo completo? La respuesta es afirmativa y para ello es conveniente incluir los grados de libertad asociados al momento angular del electrón en el grafeno.

Resulta conveniente introducir la coordenada compleja  $z$ :

$$\begin{aligned} z &= x + iy, & z^* &= x - iy, \\ \partial_z &= \frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y} & \partial_{z^*} &= \frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Lo anterior nos permite escribir el hamiltoniano  $H_G$  y el momento angular de los portadores de carga como

$$\begin{aligned} H_G &= -2i\hbar v_F(\sigma_+\partial_z + \sigma_-\partial_z^*), \\ L &= \hbar(z\partial_z - z^*\partial_z^*). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Hacemos notar que el movimiento del electrón está restringido al plano  $xy$  por lo que el momento angular sólo tiene componente  $z$ , es decir  $L = -i\hbar\partial_\theta$ . Utilizando los resultados anteriores se pueden construir los siguientes operadores que dan lugar a cantidades conservadas del sistema

$$\begin{aligned} \hat{N} &= a^\dagger a + \frac{1}{\hbar}J, \\ \hat{K} &= g(\sigma_+a + \sigma_-a^\dagger) - \frac{\omega}{\hbar}J - 2iv_F(\sigma_+\partial_z + \sigma_-\partial_z^*). \end{aligned} \quad (4.9)$$

En esta ecuación  $J$  sería un “momento angular total del electrón”  $J = L + \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ . Se puede comprobar de forma directa que  $\hat{N}$  y  $\hat{K}$  conmutan con el hamiltoniano completo del sistema:  $[\hat{N}, H] = [\hat{K}, H] = 0$ , y conmutan entre si  $[\hat{N}, \hat{K}] = 0$ . Es importante notar que el operador  $\hat{N}$  incluye grados de libertad del fotón y del electrón. Por lo que  $\hat{N}$  se puede identificar como un operador que representa las excitaciones totales del sistema fotón-electrón. Por lo tanto es de esperar que los eigenestados del hamiltoniano ec.(4.3) sean estados ligados fotón-electrón que representan cuasipartículas del sistema al que da lugar el grafeno irradiado por fotones. Las tres cantidades conservadas del sistema:  $H$ ,  $\hat{N}$  y  $\hat{K}$  no son independientes, podemos comprobar que cumplen con la relación  $H = \hbar\omega\hat{N} + \hbar\hat{K}$ .

La identificación de cantidades conservadas nos resulta sumamente útil para construir de manera adecuada una representación que nos permita encontrar los eigenestados del sistema. Para esto utilizamos los estados de número del campo electromagnético  $|n\rangle$  y los estados que representan la localización del electrón en las subredes  $A$  y  $B$  del grafeno ( $|A\rangle, |B\rangle$ ). Consideremos productos externos del tipo  $|n\rangle \times |A\rangle$  y  $|n\rangle \times |B\rangle$ . Tomando en

cuenta que los estados  $|A\rangle$  y  $|B\rangle$  se pueden identificar con los espinores  $(1, 0)^T$  y  $(0, 1)^T$ , encontramos que la siguiente representación es un eigenestado del operador  $\hat{N}$

$$\Psi_N = \sum_{n=-1}^{\infty} e^{i(N-n)\theta} J_{n-N}(\xi) \begin{pmatrix} \alpha_n |n\rangle \\ \beta_n |n+1\rangle \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

donde utilizamos coordenadas polares  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$  y  $\theta = \arctan(y/x)$ ;  $J_{n-N}(\xi)$  son los polinomios de Bessel con argumento  $\xi = k\rho$ , donde  $k = |p|/\hbar$ . Es interesante señalar que  $k$  es la magnitud del vector de onda de las cuasipartículas descritas por la función de onda  $\Psi_N$ , que representa electrones “vestidos” por el campo electromagnético circularmente polarizado. El estado  $\Psi_N$  está caracterizado por el número  $N$  de excitaciones fundamentales, sin embargo en general no tiene un número definido de fotones, y el momento angular del electrón tampoco tiene un valor definido.

Utilizando la definición de  $\hat{N}$  en la ec.(4.9) se comprueba directamente que

$$\hat{N}\Psi_N = \left(N + \frac{1}{2}\right)\Psi_N. \quad (4.11)$$

Notamos que de acuerdo a su definición ec.(4.9),  $\hat{N}$  no es un operador positivo definido, tomando en cuenta la unicidad de la solución en ec.(4.10), los valores posibles de  $N$  son enteros,  $N = 0 \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

Para determinar el espectro y eigenfunciones del sistema sustituimos la función de onda  $\Psi_N$  en la ecuación de eigenvalores para la energía  $H\Psi_N = E\Psi_N$  donde  $H$  es el hamiltoniano completo del problema ec.(4.3). Después de un cálculo detallado encontramos el siguiente sistema de ecuaciones de recurrencia

$$\begin{aligned} (\kappa - n) \alpha_n &= g' \sqrt{n+1} \beta_n + ik' \beta_{n-1} \\ (\kappa - (n+1)) \beta_n &= g' \sqrt{n+1} \alpha_n - ik' \alpha_{n+1}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

En la ecuación anterior se utilizaron las siguientes definiciones para las variables adimensionales  $\kappa = E/\hbar\omega$ ,  $g' = g/\omega$  y  $k' = v_F k/\omega$ . Tomando en cuenta que los coeficientes  $\alpha_n$  y  $\beta_n$  aparecen multiplicando en la ec.(4.10) a los kets  $|n\rangle$  y  $|n+1\rangle$  respectivamente, tenemos que se debe cumplir que  $\alpha_{-1} = \beta_{-2} = 0$ . Es interesante observar que en el conjunto de ecuaciones ec.(4.12) no aparece el número cuántico  $N$ , por lo que en general esperamos que exista una degeneración en las soluciones, en cuanto a que la energía no dependa de  $N$ .

## 4.2. Modelo de Jaynes-Cummings en el punto de Dirac

En el punto de Dirac  $k = 0$ , el conjunto de ecuaciones anterior (4.12) se desacopla para diferentes valores de  $n$  y nos permite recuperar el modelo de Jaynes-Cummings. Debido a que la solución de este modelo nos servirá para cálculos posteriores, presentamos algunos detalles. Resulta conveniente definir el espinor

$$\phi_n = \begin{pmatrix} \beta_n \\ \alpha_n \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

En términos de este espinor las ecuaciones de recurrencia ec.(4.12) se desacoplan cuando  $k = 0$  para diferentes valores de  $n$ , y se pueden escribir como una ecuación de eigenvalores  $\mathcal{H}_n \phi_n = \kappa \phi_n$  donde el hamiltoniano  $\mathcal{H}_n$  está dado por la siguiente matriz

$$\mathcal{H}_n = \begin{pmatrix} (n+1) & g'\sqrt{n+1} \\ g'\sqrt{n+1} & n \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

Los eigenvalores se calculan de forma inmediata y coinciden con la solución de Jaynes-Cummings (para restablecer variables con dimensiones recordamos que  $\mathcal{E} = \hbar\omega\kappa$ )

$$\mathcal{E}_n^\pm = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \pm \hbar\Omega_n^R, \quad (4.15)$$

donde  $\Omega_n^R$  es la frecuencia de Rabi dada por

$$\Omega_n^R = \sqrt{g^2(n+1) + \frac{1}{4}\omega^2}. \quad (4.16)$$

En lo sucesivo utilizaremos la notación  $\mathcal{E}_n^\pm$  para referirnos a los eigenvalores de Jaynes-Cummings en la ec.(4.15), mientras que  $E_n^\pm$  se utilizará para las soluciones generales cuando  $k \neq 0$ .

Los eigenestados correspondientes se pueden escribir de la siguiente manera

$$\phi_{JC,n}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1+\eta_n} \\ \sqrt{1-\eta_n} \end{pmatrix}, \quad \phi_{JC,n}^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{1-\eta_n} \\ \sqrt{1+\eta_n} \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

donde

$$\eta_n = \frac{\omega}{2\Omega_n^R}. \quad (4.18)$$

Para referencia posterior nos conviene introducir el ángulo  $\varphi_n$  definido como

$$\varphi_n = \arctan\left(\frac{\sqrt{1-\eta_n}}{\sqrt{1+\eta_n}}\right) = \arctan\left(\frac{g\sqrt{n+1}}{\Omega_n^R + \omega/2}\right). \quad (4.19)$$

La solución para la función de onda completa, incluyendo los grados de libertad relacionados al número de fotones, se obtiene de la expresión ec.(4.10), considerando la solución de  $\phi_n^\pm$  en ec.(4.17) y tomando en cuenta que en el punto  $k = 0$  las soluciones no nulas requieren de la condición  $n \equiv N$ , ya que  $J_{n-N}(0) = \delta_{n-N}$ . Resulta que

$$\Psi_{JC,n}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1-\eta_n} |n\rangle \\ \sqrt{1+\eta_n} |n+1\rangle \end{pmatrix} \quad \Psi_{JC,n}^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1+\eta_n} |n\rangle \\ -\sqrt{1-\eta_n} |n+1\rangle \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Se puede comprobar de manera directa que en el punto de Dirac ( $k = 0$ ) las soluciones para la función de onda en ec.(4.20) diagonalizan al hamiltoniano ec.(4.3) y son eigenestados de los operadores  $\hat{N}_{JC}$  y  $\hat{K}_{JC}$  definidos en ec.(4.6).

### 4.3. Cuasipartículas electrón-fotón

Regresemos a considerar el caso general ( $k \neq 0$ ), notando que en términos de los espinores  $\phi_n = (\beta_n, \alpha_n)^T$ , el conjunto de ecuaciones de recurrencia ec.(4.12) se pueden reescribir de la siguiente forma

$$\kappa\phi_n = \mathcal{H}_n\phi_n - ik\sigma_+\phi_{n+1} + ik\sigma_-\phi_{n-1}, \quad (4.21)$$

sujeto a la condición  $\phi_{-1} = (\beta_{-1}, 0)^T$  y  $\phi_{-2} = (0, 0)^T$ .

En este caso la ecuación de eigenvalores para la energía conecta a los espinores  $\phi_n$  con los dos vecinos inmediatos  $\phi_{n-1}$  y  $\phi_{n+1}$ . Es decir en la parte derecha de la ecuación (4.21) se pueden identificar los elementos de una matriz infinita (acotada por abajo) que actúa sobre un espinor  $\Phi$  de dimensión infinita, cuyas componentes son los espinores  $\phi_n$  de dimensión 2:  $\Phi = (\dots, \phi_{n+1}, \phi_n, \phi_{n-1}, \dots, \phi_{-1})^T$ , donde tomamos en cuenta que  $\phi_n$  se anula para  $n < -1$ . Lo anterior es muy conveniente ya que tenemos una

expresión explícita de una matriz tridiagonal “infinita”, la cual podemos truncar y diagonalizar numéricamente. Explícitamente la matriz tiene la forma

$$\begin{bmatrix}
 \ddots & & & & & & \vdots \\
 & (n+2) & g'\sqrt{n+2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & g'\sqrt{n+2} & (n+1) & ik' & 0 & 0 & 0 \\
 & 0 & -ik' & (n+1) & g'\sqrt{n+1} & 0 & 0 \\
 & 0 & 0 & g'\sqrt{n+1} & n & ik' & 0 \\
 & 0 & 0 & 0 & -ik' & n & g'\sqrt{n} \\
 & 0 & 0 & 0 & 0 & g'\sqrt{n} & (n-1) \\
 & & & \vdots & & & \ddots
 \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

En la figura 4.1, mostramos la relación de dispersión como función del momento  $k'$ , que se obtiene al diagonalizar numéricamente la matriz (4.22) para diferentes valores de la constante de acoplamiento electrón-fotón  $g' = g/\omega$ . Se utiliza una matriz truncada de dimensión  $25 \times 25$ , con lo cual se obtiene convergencia de los resultados obtenidos en la región que se muestra en las gráficas.

En la figura 4.1(a) observamos que cuando la interacción electrón-fotón se anula ( $g = 0$ ), el espectro de energía corresponde a una relación de dispersión lineal con un conjunto de réplicas de Floquet, debido a una serie de conos de Dirac desplazados por un valor semientero es decir  $\kappa = n + \frac{1}{2} \pm k'$ . A medida que la constante de acoplamiento  $g'$  se incrementa, observamos que se generan brechas de energía, las primeras se observan en  $k = 0$  y en  $k = \omega/2v_F$  como resultado de un cruce evitado de niveles de energía, este efecto se hace más evidente a medida que la magnitud de  $g$  se incrementa pues aparecen nuevos cruces evitados siendo clara la aparición de nuevas brechas de energía.

El espectro mostrado en las gráficas de la figura 4.1, representa la relación de dispersión de las cuasipartículas o modos de propagación electrón-fotón que resultan cuando se considera la irradiación de grafeno con luz circular-

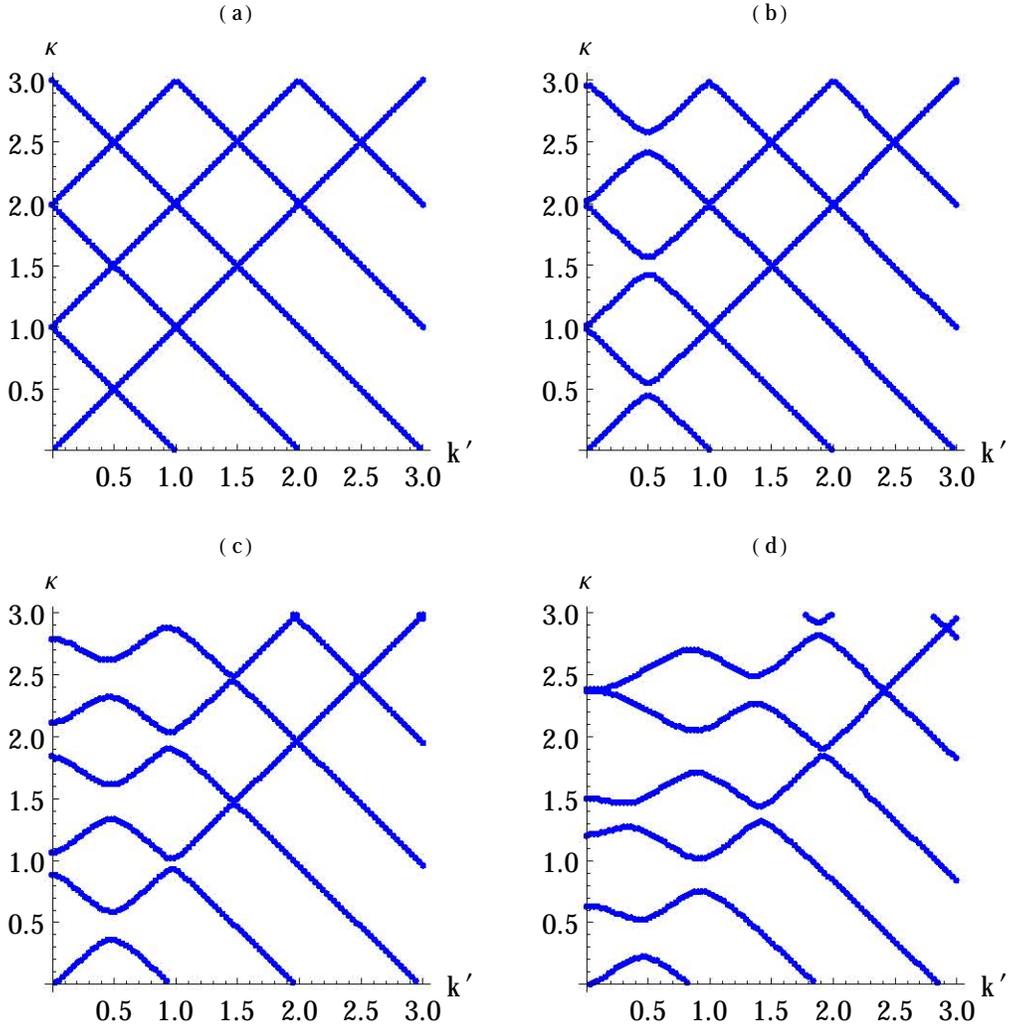


Figura 4.1: Gráficas para la relación de dispersión:  $\kappa \equiv E/\hbar\omega$  vs  $k' \equiv v_F k/\omega$ . Se ha considerado una matriz de dimensión  $25 \times 25$ . Los valores para la constante de acoplamiento electrón-fotón  $g' = g/\omega$  son los siguientes: (a)  $g = 0$ , (b)  $g/\omega = 0.1$ , (c)  $g/\omega = 0.25$  y (d)  $g/\omega = 0.5$ .

mente polarizada y se toma en cuenta la cuantización del campo electromagnético. Con la finalidad de analizar y entender las propiedades de estas cuasipartículas es conveniente implementar aproximaciones que nos permitan obtener soluciones analíticas. De las gráficas observamos que en la región

de momentos pequeños  $k \leq \omega/v_F$  y constante de acoplamiento relativamente pequeña  $g = 0.25$ , el espectro presenta una serie de brechas tanto en  $k = 0$  como en  $k = \omega/2v_F$ . Por lo cual tenemos que el espectro consiste de una serie de bandas, localizadas entre las regiones  $\kappa = n + 1/2$  y  $\kappa = n + 3/2$ .

A continuación presentamos una aproximación que nos permite obtener soluciones analíticas aproximadas, que describen de manera adecuada el régimen de momento y constante de acoplamiento pequeños.

Al considerar la ecuación de recurrencia en términos de los espinores  $\phi_n$  ec.(4.21), recordamos que el primer término de lado derecho correspondiente al hamiltoniano  $\mathcal{H}_n$  de Jaynes-Cummings se puede diagonalizar exactamente, ya que conocemos sus eigenfunciones, las cuales están dadas en las ecuaciones ec.(4.17). Consideremos la transformación

$$\xi_n = U^\dagger \phi_n, \quad \xi_n = \begin{pmatrix} f_n \\ g_n \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

donde  $U$  se construye a partir de los eigenestados (4.17)

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1+\eta_n} & -\sqrt{1-\eta_n} \\ \sqrt{1-\eta_n} & \sqrt{1+\eta_n} \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Aplicando la transformación generada por  $U$  a la ec.(4.21) obtenemos la siguiente relación de recurrencia

$$\kappa \xi_n = \tilde{\mathcal{H}}_n \xi_n - ik' \tilde{\sigma}_+ \xi_{n+1} + ik' \tilde{\sigma}_- \xi_{n-1}, \quad (4.25)$$

donde tal y como se espera el hamiltoniano de Jaynes-Cummings se diagonaliza

$$\tilde{\mathcal{H}}_n = U^\dagger \mathcal{H}_n U = \begin{pmatrix} \epsilon_n^+ & 0 \\ 0 & \epsilon_n^- \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

aquí definimos  $\epsilon_n^\pm = \mathcal{E}_n^\pm / \hbar \omega$ , donde recordamos que  $\mathcal{E}_n^\pm$  corresponde a las soluciones del modelo de Jaynes-Cummings dadas en la ec.(4.15). El efecto de la transformación sobre las matrices de ascenso y descenso es el siguiente:

$$\tilde{\sigma}_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{1-\eta_n^2} & 1+\eta_n \\ -(1-\eta_n) & -\sqrt{1-\eta_n^2} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\sigma}_- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{1-\eta_n^2} & -(1-\eta_n) \\ 1+\eta_n & -\sqrt{1-\eta_n^2} \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

De manera similar a lo discutido anteriormente, observamos que el sistema de ecuaciones recurrentes en la ec.(4.25) da lugar a una ecuación de eigenvalores

determinada por una matriz infinita y acotada por abajo, que actúa sobre un espinor  $\Xi$  de dimensión infinita, cuyas componentes son los espinores  $\xi_n$  de dimensión 2:  $\Xi = (\dots, \xi_{n+1}, \xi_n, \xi_{n-1}, \dots, \xi_{-1})^T$ , donde tomamos en cuenta que  $\xi_n$  se anula para  $n < -1$ . El hamiltoniano correspondiente se puede escribir de la siguiente forma

$$\left[ \begin{array}{cccc} \ddots & & & \vdots \\ \epsilon_{n+1}^+ & 0 & \frac{ik'}{2} \sqrt{1 - \eta_{n+1}^2} & -\frac{ik'}{2} (1 - \eta_{n+1}) \\ 0 & \epsilon_{n+1}^- & \frac{ik'}{2} (1 + \eta_{n+1}) & -\frac{ik'}{2} \sqrt{1 - \eta_{n+1}^2} \\ -\frac{ik'}{2} \sqrt{1 - \eta_n^2} & -\frac{ik'}{2} (1 + \eta_n) & \epsilon_n^+ & 0 \\ \frac{ik'}{2} (1 - \eta_n) & \frac{ik'}{2} \sqrt{1 - \eta_n^2} & 0 & \epsilon_n^- \\ & \vdots & & \ddots \end{array} \right] \quad (4.28)$$

Esta representación del hamiltoniano efectivo no es tridiagonal, a diferencia de la representación anterior ec.(4.22), que se utilizó para obtener las soluciones numéricas de la figura 4.1. Sin embargo, la utilidad de la representación en la ec.(4.28) es que en el régimen en el que  $k'$  y la constante de acoplamiento son pequeñas, la matriz infinita ec.(4.28) se reduce a un conjunto de hamiltonianos desacoplados de dimensión  $2 \times 2$ . En efecto notamos que si se cumple la condición

$$\gamma_n = \frac{2g^2(n+1)}{\omega^2} \ll 1, \quad (4.29)$$

tenemos (ver ec.(4.18)) que  $\eta_n \approx 1 + \gamma_n$ , con lo cual los términos que aparecen en la segunda y tercera líneas fuera de la diagonal son de orden  $k'\gamma_n$  y se pueden despreciar, mientras que los términos de la primera línea fuera de la diagonal se pueden aproximar por  $\frac{1}{2}k'(2 + \gamma_n) \rightarrow k'$ . Tomando en cuenta lo anterior, obtenemos que la matriz no sólo es tridiagonal, sino que se reduce a un conjunto de matrices desacopladas de dimensión 2. El  $n$ -ésimo bloque corresponde a la matriz

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{n+1}^- & ik' \\ -ik' & \epsilon_n^+ \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

Por lo que se justifica utilizar la siguiente ecuación de eigenvalores

$$E\chi_n = \begin{pmatrix} \epsilon_{n+1}^- & ik' \\ -ik' & \epsilon_n^+ \end{pmatrix} \chi_n. \quad (4.31)$$

El espinor de dimensión 2,  $\chi_n$  es una de las componentes del espinor infinito  $\Xi$ , sin embargo no coincide con  $\xi_n$ . Lo anterior se debe a que el bloque independiente que se seleccionó de la matriz infinita contiene en la diagonal las energías de Jaynes-Cummings  $(\epsilon_{n+1}^-, \epsilon_n^+)$  en lugar de  $(\epsilon_n^+, \epsilon_n^-)$ . Es decir, las componentes de  $\chi_n$  y  $\xi_n$  están desfasadas. La componente superior de  $\chi_n$  coincide con la componente inferior  $\xi_{n+1}$ , mientras que la componente inferior  $\chi_n$  coincide con la componente superior de  $\xi_n$ , es decir

$$\chi_n = \begin{pmatrix} g_{n+1} \\ f_n \end{pmatrix}. \quad (4.32)$$

Resolviendo la ecuación de eigenvalores en la ec.(4.31) obtenemos la siguiente relación de dispersión

$$E_n^\pm = \hbar\delta_n \pm \hbar\Lambda_n, \quad (4.33)$$

donde

$$\Lambda_n = \sqrt{(\Omega_n)^2 + (v_F k)^2}, \quad (4.34)$$

además

$$\delta_n = \frac{1}{2\hbar}(\mathcal{E}_{n+1}^- + \mathcal{E}_n^+), \quad \Omega_n = \frac{1}{2\hbar}(\mathcal{E}_{n+1}^- - \mathcal{E}_n^+). \quad (4.35)$$

La expresión para la relación de dispersión ec.(4.33) reproduce los límites correctos:

- (a) Si se apaga el efecto de la radiación  $g = \omega = 0$ , se obtiene la relación de dispersión de Dirac para portadores de carga en grafeno  $E = \pm\hbar v_F k$ .
- (b) En el punto de Dirac  $k = 0$  se recupera el resultado de Jaynes-Cummings con la siguiente asociación:  $E_n^+ \rightarrow \mathcal{E}_n^+$  y  $E_n^- \rightarrow \mathcal{E}_{n+1}^-$ .

A continuación mostraremos que la relación de dispersión ec.(4.33) brinda una muy buena aproximación al comparar con los resultados numéricos del modelo completo.

En la figura 4.2 comparamos la relación de dispersión obtenida al diagonalizar el hamiltoniano completo ec.(4.22) con la obtenida en la aproximación analítica dada en ec. (4.33). Para la constante de acoplamiento se seleccionan los valores  $g' = g/\omega = 0.1$  y  $g' = g/\omega = 0.2$ , que cumplen con la

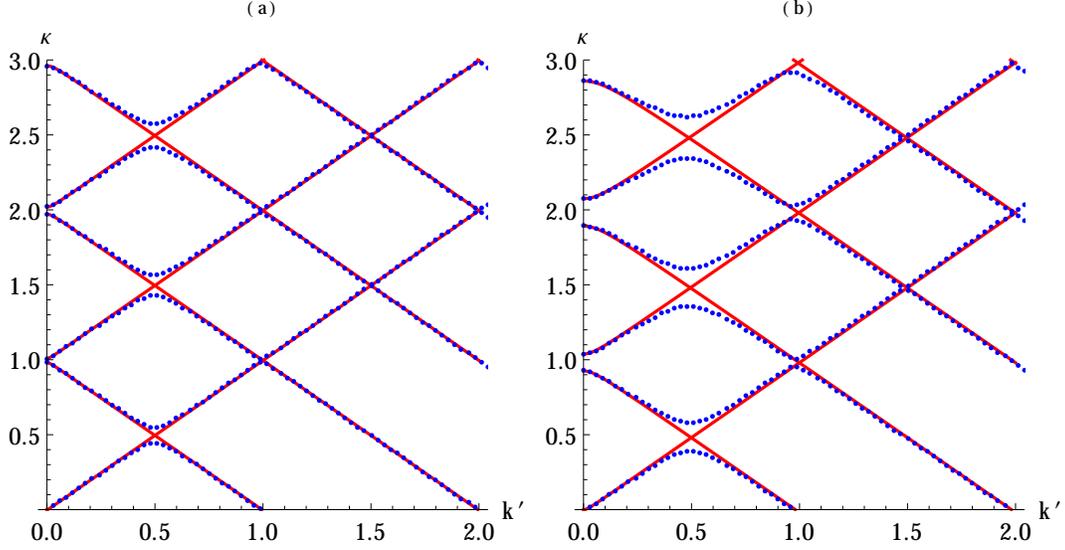


Figura 4.2: Gráficas para la relación de dispersión:  $\kappa \equiv E/\hbar\omega$  vs  $k' \equiv v_F k/\omega$ . La línea continua (color rojo) corresponde a la aproximación analítica ec. (4.33). Mientras que la línea de puntos (color azul) se obtiene al diagonalizar el hamiltoniano completo ec.(4.22), la dimensión de la matriz truncada se eligió de  $17 \times 17$ . El valor de la constante de acoplamiento es  $g' = g/\omega = 0.1$  en (a) y  $g' = 0.2$  en (b)

condición requerida  $\gamma_n < 1$  ec.(4.29) para los primeros valores de  $n < 50, 15$  respectivamente. Observamos claramente un muy buen acuerdo entre ambos resultados, sobre todo en la región de  $k$  pequeña; en particular se muestran claramente las brechas que se generan en  $k = 0$ . El acuerdo es excelente en general, excepto cerca de los puntos de cruce en  $k = \omega/2v_F$  donde no se reproducen las brechas que se generan en esos puntos.

Podemos concluir que los eigenvalores en la ec.(4.33) brindan una descripción correcta de las cuasipartículas electrón-fotón si su momento se encuentra en la región  $k < \omega/2v_F$ .

Para los eigenestados obtenemos el siguiente resultado

$$\chi_n^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{1 + \frac{\Omega_n}{\Lambda_n}} \\ i\sqrt{1 - \frac{\Omega_n}{\Lambda_n}} \end{pmatrix}, \quad \chi_n^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \frac{\Omega_n}{\Lambda_n}} \\ i\sqrt{1 + \frac{\Omega_n}{\Lambda_n}} \end{pmatrix}, \quad (4.36)$$

Tomando en cuenta que conocemos los eigenvalores del hamiltoniano en ec.(4.31) podemos aplicar el operador de evolución para obtener la evolución temporal de estas eigenfunciones:

$$\tilde{\chi}_n^\pm(t) = e^{-iE_n^\pm t/\hbar} \chi_n^\pm. \quad (4.37)$$

Ahora podemos escribir la función de onda completa incluyendo los grados de libertad de los estados de número de fotones. Haciendo referencia a la ec.(4.10), notamos que requerimos especificar los coeficientes  $\alpha_n$  y  $\beta_n$  que forman parte del espinor  $\phi_n = (\beta_n, \alpha_n)^T$ , el cual a su vez se relaciona con el espinor  $\xi_n$  por medio de la transformación  $\xi_n = U^\dagger \phi_n$ , ec.(4.23). Finalmente recordamos que introducimos un nuevo espinor  $\chi_n$ , cuyas componentes están desfasadas respecto a las componentes de  $\xi_n$ , ec.(4.32). El resultado de estas transformaciones produce las siguientes relaciones

$$\phi_n^s = f_n^s \phi_{JC,n}^+, \quad \phi_{n+1}^s = g_{n+1}^s \phi_{JC,n+1}^-, \quad (4.38)$$

donde  $s = \pm$ . Es decir, para los estados de energía  $E_n^\pm$  (ec.(4.33)) la solución aproximada tiene dos contribuciones: el término  $n$  correspondiente al espinor  $\phi_n^s$  es proporcional al espinor (+) de Jaynes-Cummings en ec.(4.17) con coeficiente  $f_n^s$ . Mientras que para el término  $n+1$  la contribución a  $\phi_{n+1}^s$  proviene del espinor (-) de Jaynes-Cummings con coeficiente  $g_{n+1}^s$ . Los coeficientes  $g_{n+1}^\pm$  y  $f_n^\pm$  son las componentes de los espinores  $\chi_n^\pm$  en ec.(4.36). Explícitamente están dadas por:

$$\begin{aligned} g_{n+1}^+ = i f_n^- &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\Omega_n}{\Lambda_n}} \\ g_{n+1}^- = -i f_n^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{\Omega_n}{\Lambda_n}}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Tomando en cuenta lo anterior la función completa que incluye los grados de libertad de los estados de número del fotón queda dada como

$$\Psi_{N,n,k}^s = e^{i(N-n)\theta} \left( f_n^s J_{n-N}(\xi) \Psi_{JC,n}^+ + e^{-i\theta} g_{n+1}^s J_{n+1-N}(\xi) \Psi_{JC,n+1}^- \right), \quad (4.40)$$

donde nuevamente  $s = \pm$ . Vemos que  $\Psi_{N,n,k}^s$  es una combinación de las soluciones  $\Psi_{JC,n}^+$  y  $\Psi_{JC,n+1}^-$ , de Jaynes-Cummings, ec.(4.20), con coeficientes  $f_n^s$  y  $g_{n+1}^s$  que son las componentes de los espinores  $\chi_n^s$ , ecs. (4.36) y (4.39).

Resulta útil escribir explícitamente el espinor de la función de onda  $\Psi_{N,n,k}^{\pm}$ , tomando en cuenta la estructura de los estados de Jaynes-Cummings en la ec. (4.19), la expresión resultante es:

$$\Psi_{N,n,k}^{\pm} = e^{i(N-n)\theta} \times \left( \begin{array}{l} f_n^{\pm} \sin \varphi_n J_{n-N}(\xi) |n\rangle + e^{-i\theta} g_{n+1}^{\pm} \cos \varphi_{n+1} J_{n+1-N}(\xi) |n+1\rangle \\ f_n^{\pm} \cos \varphi_n J_{n-N}(\xi) |n+1\rangle - e^{-i\theta} g_{n+1}^{\pm} \sin \varphi_{n+1} J_{n+1-N}(\xi) |n+2\rangle \end{array} \right). \quad (4.41)$$

Podemos comprobar que en el punto de Dirac ( $k = 0$ ), la función de onda  $\Psi_{N,n,k}^{\pm}$ , ecs. (4.40,4.41) se reduce a la solución de Jaynes-Cummings (ec.4.19):

$$\Psi_{N,n,0}^{+} = -\delta_{n+1,N} \Psi_{JC,n+1}^{-}, \quad \Psi_{N,n,0}^{-} = -\delta_{n,N} \Psi_{JC,n}^{+}. \quad (4.42)$$

Por otro lado si consideramos el límite en que el acoplamiento electrón-fotón se anula ( $g = 0$ ), la función de onda se reduce a la expresión siguiente

$$\Psi_{N,n,k}^{\pm} = e^{i(N-n)\theta} \left( \begin{array}{l} \mp e^{-i\theta} J_{n+1-N}(\xi) \\ i J_{n-N}(\xi) \end{array} \right) |n+1\rangle, \quad (4.43)$$

que identificamos como el producto directo del estado de  $n+1$  fotones por el espinor del grafeno libre (expresado en coordenadas polares).

La función de onda  $\Psi_{N,n,k}^{\pm}$  en las ecs. (4.40,4.41) es eigenfunción del operador  $\hat{N}$ , por lo que está caracterizado por el número cuántico  $N$  que representa el número total de excitaciones totales del sistema, lo cual incluye grados de libertad del electrón y del fotón. De la ec.(4.41), vemos que la función de onda  $\Psi_{N,n,k}^{\pm}$  tiene contribuciones de los estados de número fotónico:  $|n\rangle$ ,  $|n+1\rangle$  y  $|n+2\rangle$ , por lo que estrictamente no es eigenfunción del operador de número fotónico  $a^{\dagger}a$ , sin embargo se utiliza la etiqueta  $n$  ya que  $\Psi_{N,n,k}^{\pm}$  se construye a partir de las componentes del espinor  $\chi_n^{\pm}$  en ec.(4.36) y por consiguiente tiene de manera aproximada el eigenvalor de energía  $E_n^{\pm}$  dado en la ec.(4.33). De manera análoga se aplica el mismo argumento para  $\Psi_{N,n,k}^{-}$ . La evolución temporal de estos estados está dada por

$$\tilde{\Psi}_{N,n,k}^{\pm}(t) = e^{-iE_n^{\pm}t/\hbar} \Psi_{N,n,k}^{\pm}. \quad (4.44)$$

Se comprueba de forma directa que las funciones de onda  $\Psi_{N,n,k}^{\pm}$  en la ec.(4.40)

cumplen las siguientes condiciones de ortonormalidad:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{N,n,k}^s | \Psi_{N',n',k'}^{s'} \rangle &= \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\theta \Psi_{N,n,k}^{s\dagger} \Psi_{N',n',k'}^{s'} \\ &= \frac{\delta(k-k')}{k} \delta_{N,N'} \delta_{n,n'} \delta_{s,s'}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

donde  $s, s' = \pm$ ; se tomó en cuenta que  $|g_{n+1}^s|^2 + |f_n^s|^2 = 1$  y la siguiente propiedad de las funciones de Bessel

$$\int_0^\infty J_m(k\rho) J_m(k'\rho) \rho d\rho = \frac{1}{k} \delta(k-k'). \quad (4.46)$$

Para calcular valores esperados de las observables del sistema requerimos definir estados que son combinaciones lineales de las funciones  $\Psi_{N,n,k}^s$ . Por ejemplo el estado  $\Psi_{N,n}^s$  se obtiene sumando componentes de diferentes valores de  $k$ :

$$\Psi_{N,n}^s = \int_0^\infty \sqrt{\rho(k)} \Psi_{N,n,k}^s k dk \quad (4.47)$$

donde la función de distribución de los momentos cumple la siguiente condición de normalización

$$\int_0^\infty \rho(k) k dk = 1 \quad (4.48)$$

Podemos por ejemplo, calcular el valor promedio del operador de número fotónico y del momento angular para el estado  $\Psi_{N,n,k}^\pm$ , suponiendo que  $n \gg 1$ , obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{N,n,k}^s | a^\dagger a | \Psi_{N,n,k}^s \rangle &= n + 1 + \sin^2 \varphi_n \langle |g_{n+1}^s|^2 \rangle, \\ \langle \Psi_{N,n,k}^s | L | \Psi_{N,n,k}^s \rangle &= N - n - \langle |g_{n+1}^s|^2 \rangle, \end{aligned} \quad (4.49)$$

donde

$$\langle |g_{n+1}^s|^2 \rangle = \int_0^\infty \rho(k) |g_{n+1}^s|^2 k dk \leq 1. \quad (4.50)$$

El valor esperado del número fotónico está acotado de acuerdo a:  $n < \langle a^\dagger a \rangle < n + 2$ . Sin embargo en el límite  $\gamma_n = 0$  ( $\varphi_n = 0$ ) el valor esperado se reduce a  $n + 1$ , ya que en este caso la función de onda ec.(4.40) sí es eigenfunción de  $a^\dagger a$  con eigenvalor  $n + 1$ . El valor esperado del momento angular puede tomar cualquier valor, ya que  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  pero  $N$  puede ser un número entero cualquiera.

De acuerdo a lo que hemos presentado podemos concluir que cuando el grafeno es irradiado por una onda electromagnética circularmente polarizada se generan estados ligados electrón-fotón o cuasipartículas que son descritas adecuadamente por las ecuaciones ec.(4.33) y ec.(4.36). La región de validez está definida por las siguientes condiciones:  $k < \omega/2v_F$  y  $\gamma_n = 2g^2(n+1)/\omega^2 \ll 1$ . Esta última condición nos permite distinguir dos escenarios, a continuación discutiremos las propiedades de la relación de dispersión en ambos casos.

### 4.3.1. Límite semiclásico

El primero que llamaremos el límite semiclásico considera un número muy grande y fijo de fotones ( $n_0 \gg 1$ ), pero con una constante  $g$  suficientemente pequeña de tal forma que se mantenga la condición  $\gamma_n \ll 1$ . En este caso en las ecuaciones ec.(4.35) podemos aproximar  $n+1 \rightarrow n$ , con lo cual tenemos que

$$\delta_n = \hbar\omega n, \quad \Omega_n = \Omega_n^R, \quad \Lambda_n = \sqrt{(\Omega_n^R)^2 + (v_F k)^2}, \quad (4.51)$$

y la relación de dispersión se reduce a

$$E_n^\pm = \hbar\omega n_0 \pm \hbar\sqrt{\frac{\omega^2}{4} + \lambda^2 + (v_F k)^2}, \quad (4.52)$$

donde la constante de acoplamiento  $\lambda$  está dada por  $\lambda = g\sqrt{n_0}$ . La energía del sistema de acuerdo a este resultado, contiene la energía del campo electromagnético  $\hbar\omega n_0$  y el resto que se puede interpretar como la relación de dispersión de las cuasipartículas o estados vestidos del electrón, que son el resultado del fuerte acoplamiento entre el electrón y el campo electromagnético. La relación de dispersión para esta cuasipartícula está dada por

$$\Delta_n^\pm(k) = \pm\hbar\sqrt{\frac{\omega^2}{4} + \lambda^2 + (v_F k)^2}. \quad (4.53)$$

La cual claramente se identifica como la relación de dispersión de una partícula relativista de masa  $m_c = \left(\hbar\sqrt{\frac{\omega^2}{4} + \lambda^2}\right)/v_F^2$ .

En la figura 4.3 se muestra la gráfica de  $\Delta_n^\pm(k)$  vs.  $k$ , la cual muestra las dos ramas  $-$  y  $+$  correspondientes a las bandas de valencia y conducción separadas por una brecha dada por

$$\Delta_n = 2\hbar\sqrt{\frac{\omega^2}{4} + \lambda^2}. \quad (4.54)$$

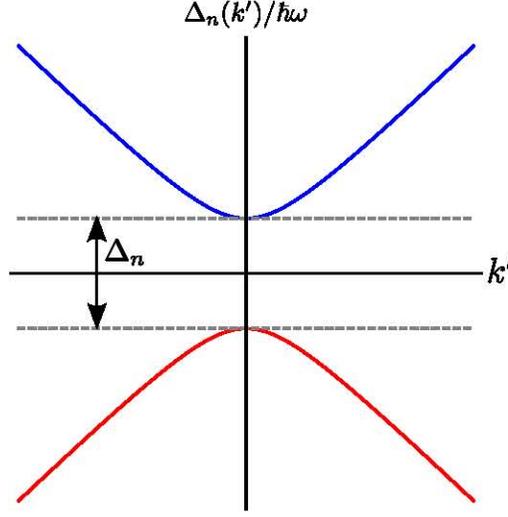


Figura 4.3: Relación de dispersión para electrones vestidos en el límite clásico ec.(4.53) en función de la magnitud del momento  $k'$ . La curva superior representa la banda de conducción y la curva inferior la banda de valencia. Se han considerado los parámetros:  $g^2 n_0 / \omega^2 = 0.01$

Observamos que el valor de la brecha inducida por la radiación electromagnética en el límite semiclásico  $n_0 \gg 1$ , está determinada por la frecuencia de Rabi, ya que de acuerdo a las ecs. (4.16) y (4.54) tenemos que  $\Delta_n = 2\hbar\Omega_n^R$ . También hacemos notar que  $\Delta_n$  coincide con el valor de la brecha dinámica inducida por ondas electromagnéticas clásicas estudiadas anteriormente.

### 4.3.2. Caso cuántico

En este caso la condición  $\gamma_n = 2g^2(n+1)/\omega^2 \ll 1$  se satisface manteniendo el número de fotones  $n$  pequeño. En este caso consideramos las ecuaciones (4.35) y hacemos un desarrollo manteniendo los términos dominantes en  $\gamma_n$  con lo cual obtenemos para la relación de dispersión

$$E_n^\pm = \hbar\omega \left( n + 1 - \frac{g^2}{2\omega^2} \right) \pm \sqrt{\left( \hbar \frac{g^2}{\omega} \left( n + \frac{3}{2} \right) \right)^2 + (\hbar v_F k)^2}. \quad (4.55)$$

La energía del sistema contiene la energía del campo electromagnético  $\hbar\omega (n + 1)$  y el resto, asociado a la relación de dispersión de las cuasipartículas que son

el resultado del fuerte acoplamiento entre el electrón y el fotón. La relación de dispersión para esta cuasipartícula está dada por

$$\Delta_n^\pm(k) = \pm \sqrt{\left(\hbar \frac{g^2}{\omega} \left(n + \frac{3}{2}\right)\right)^2 + (\hbar v_F k)^2} - \hbar \omega \frac{g^2}{2\omega^2}. \quad (4.56)$$

esta expresión para la relación de dispersión de la cuasipartícula del sistema depende del número de fotones  $n$ . En este caso la brecha entre las bandas de valencia y conducción está dada por

$$\Delta_n = 2\hbar \frac{g^2}{\omega} \left(n + \frac{3}{2}\right). \quad (4.57)$$

Observamos que la brecha en las ecs. (4.57) y (4.54) (para  $2\lambda \ll \omega$ ) es de magnitud  $\Delta \approx \hbar g^2/\omega$ , es decir es cuadrática en la constante de acoplamiento,  $g^2$ . Lo anterior es consistente con el hecho de que es un efecto de segundo orden, ya que cerca del punto de Dirac el electrón emite y posteriormente reabsorbe un fotón, generando con ello una masa efectiva [57].

En un trabajo anterior Kibis [73] estudió la interacción entre los fermiones de Dirac sin masa del grafeno y luz cuántica polarizada circularmente. Nuestros resultados coinciden en general con su determinación de la relación de dispersión ec.(4.52), válida en el límite semiclásico. Sin embargo nuestro trabajo contiene varios resultados novedosos que no fueron abordados anteriormente. Entre ellos debemos mencionar: la identificación de constantes de movimiento, así como demostrar explícitamente que las soluciones aproximadas que se obtienen en el límite de constante de acoplamiento y momento  $k$  pequeños son correctas, en el sentido de que reproducen adecuadamente las soluciones numéricas exactas (ver fig. 4.2). En dicho artículo no se discute el límite cuántico, ni los resultados de las siguientes secciones, relacionados con las oscilaciones de Rabi y los efectos de colapsos y resurgimientos.

En conclusión; la función de onda en la ec.(4.40) representa cuasipartículas masivas resultado del acoplamiento fotón-electrón, la masa correspondiente asociada con la brecha de energía está dada por las expresiones: límite semiclásico ec.(4.54) y caso cuántico ec.(4.57). Este resultado es similar al encontrado en el estudio de la interacción entre luz clásica polarizada circularmente con grafeno [57, 74]. Sin embargo existe una diferencia esencial, en el caso de luz clásica se refiere a una brecha generada dinámicamente en un problema dependiente del tiempo. La brecha aparece en el espectro de cuasienergías, razón por la cual no se puede determinar directamente de un análisis

de la densidad de estados del sistema; aunque produce discontinuidades en la conductancia [50, 57, 58, 74]. En nuestro caso, la dinámica del sistema, resultado de la interacción entre luz cuantizada y el grafeno, se describe por un hamiltoniano independiente del tiempo ec. (4.3), la brecha aparece en el espectro de eigenvalores de dicho hamiltoniano.

## 4.4. Colapsos y resurgimientos en paquetes de onda en grafeno

Una vez que hemos determinado el espectro y la función de onda que caracteriza a las cuasipartículas electrón-fotón para el sistema de grafeno irradiado por ondas polarizadas circularmente, nos interesa estudiar algunas de sus propiedades dinámicas. En particular analizaremos la evolución temporal de paquetes de ondas, lo cual da lugar a las oscilaciones de Rabi así como a fenómenos de colapsos y resurgimientos (*collapses and revivals*) que aparecen en observables del sistema.

El fenómeno de colapso y resurgimiento de paquetes de onda ha sido estudiado ampliamente, tanto desde el punto de vista teórico como experimental; una revisión general del tema se encuentra en el artículo de R. W. Robinett [75]. El fenómeno del colapso y resurgimiento cuántico está caracterizado en general por un primer periodo con comportamiento semiclásico en el que se observan las oscilaciones periódicas de Rabi, seguidas por un colapso del paquete de ondas en el cual la amplitud prácticamente se cancela, para posteriormente resurgir como pulsos localizados los cuales pueden presentar varias réplicas.

Estos fenómenos usualmente son el resultado de la interferencia de las componentes del paquete de ondas correspondiente a la evolución temporal de sistemas con estados cuantizados de energía. Las características del fenómeno dependen del espectro de energías y son independientes de los detalles del paquete inicial.

El control detallado de sistemas cuánticos ha permitido la observación del fenómeno en sistemas atómicos, moleculares y ópticos. Entre los primeros ejemplos de corroboraciones experimentales podemos mencionar: la observación de colapsos y resurgimientos de paquetes de onda formados por la superposición de estados de Rydberg electrónicos en átomos de potasio y rubidio [76, 77]. En este caso, se aprovechó el hecho de que los valores grandes

de los niveles de energía para dichos átomos se encuentran densamente espaciados y de manera aproximada su espaciamiento es uniforme. Otro ejemplo se relaciona con la evolución temporal de paquetes electrónicos localizados en presencia de un campo eléctrico externo, configuración denominada como paquetes de onda de Stark [78, 79]. En el caso de sistemas moleculares, se han observado los colapsos-resurgimientos en los paquetes de onda formados a partir de los estados vibraciones de moléculas diatómicas [79, 80].

Una aplicación de este fenómeno ha permitido implementar métodos de separación de isótopos [81]. El fenómeno de colapsos-resurgimientos de paquetes de onda se ha observado también en el caso de átomos localizados en redes ópticas. Encontrándose colapsos y resurgimientos periódicos en la evolución temporal de la función de onda macroscópica que caracteriza al condensado de Bose-Einstein [82, 83, 84].

La ecuación de Dirac para fermiones bidimensionales acoplados a un campo magnético constante tiene una estructura equivalente al modelo de Jaynes-Cummings [85]. Este hecho ha permitido analizar el colapso-resurgimiento de paquetes de onda en grafeno magnetizado, estudiando el efecto sobre el movimiento del centro de masa, así como la aparición de resurgimientos asociados con diferentes escalas de tiempo que aparecen en el estudio de la función de correlación y de la corriente eléctrica [86, 87].

#### 4.4.1. Oscilaciones de Rabi

Consideremos primero que  $N$  y el número de fotones  $n$  y  $k$  son fijos. La evolución temporal del estado la podemos escribir como (ec.(4.44))

$$\tilde{\Psi}_{N,n,k}(t) = c_1 e^{-iE_n^+ t/\hbar} \Psi_{N,n,k}^+ + c_2 e^{-iE_n^- t/\hbar} \Psi_{N,n,k}^-. \quad (4.58)$$

con las energías  $E_n^\pm$  y funciones de onda  $\Psi_n^\pm$  dadas en las ec.(4.33) y ec.(4.40) respectivamente. Los coeficientes  $c_1$  y  $c_2$  se determinan una vez que se especifican las condiciones iniciales, para esto es conveniente recordar que los coeficientes  $g_{n+1}^\pm$  y  $f_n^\pm$  que aparecen en la ec.(4.40), son las componentes del espinor  $\chi_n^\pm$  que tiene los mismos eigenvalores para las energías  $E_n^\pm$ , por lo cual nos conviene considerar la evolución del estado

$$\tilde{\chi}_n(t) = c_1 e^{-iE_n^+ t} \chi_n^+ + c_2 e^{-iE_n^- t} \chi_n^-, \quad (4.59)$$

y especificar las condiciones iniciales para estos estados. Al analizar el modelo de Jaynes-Cummings usualmente se selecciona como condiciones iniciales:

$\tilde{\chi}_n(t) = (0, 1)^T$ , o  $\tilde{\chi}_n(t) = (1, 0)^T$ , lo cual corresponde al caso en el que el átomo se encuentra en el estado base, o excitado respectivamente. Sin embargo en nuestro caso dichas condiciones corresponderían al caso en que los electrones se localizaran en los puntos de las subredes  $B$  o  $A$  respectivamente, lo cual no es una condición factible de implementarse. En lugar de lo anterior supondremos que las condiciones iniciales corresponden, en el límite  $g \rightarrow 0$ , al grafeno que se encuentra en un estado de energía negativa (hoyos),  $E_G = -\hbar v_F k$ . Lo anterior se obtiene apagando la interacción electrón-fotón ( $g = 0$ ) en las expresiones de la ec.(4.36), con lo cual se obtiene la condición inicial

$$\tilde{\chi}_n(0) \equiv \chi_G^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad (4.60)$$

aquí  $\chi_G^-$  es el espinor para estados de energía negativa (hoyos), el correspondiente espinor para los estados de energía positiva (electrones) está dado por  $\chi_G^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (-1, i)^T$ .

Tomando en cuenta estas condiciones iniciales, la evolución temporal del sistema en la ec.(4.59) se puede escribir como

$$\tilde{\chi}_n(t) = \begin{pmatrix} \tilde{g}_{n+1}(t) \\ \tilde{f}_n(t) \end{pmatrix}, \quad (4.61)$$

donde

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{n+1}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_n^+ t/\hbar} \left( 1 + \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k - \Omega_n}{\Lambda_n} \right) (e^{i2\Lambda_n t/\hbar} - 1) \right) \\ \tilde{f}_n(t) &= \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-iE_n^+ t/\hbar} \left( 1 + \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k + \Omega_n}{\Lambda_n} \right) (e^{i2\Lambda_n t/\hbar} - 1) \right). \end{aligned} \quad (4.62)$$

Recordamos que  $\Lambda_n = \frac{1}{2}(E_n^+ - E_n^-)$ .

Es claro que de acuerdo a las ecuaciones (4.59) y (4.62) tenemos que al tiempo inicial el estado se reduce al estado de energía negativa del grafeno  $\tilde{\chi}_n(0) = \tilde{\chi}_G^-$  ec.(4.60). También notamos que si se apaga el acoplamiento con el campo electromagnético ( $g = 0$ ) el estado evoluciona de acuerdo a  $\tilde{\chi}_n(t) = e^{ikt/\hbar} \chi_G^-$ , tal y como se espera para el estado de energía negativa del grafeno libre.

Tomando en cuenta lo anterior y las ecuaciones (4.40) y (4.58), es fácil comprobar que el estado completo con función de onda  $\tilde{\Psi}_{N,n,k}(t)$  queda dado

por

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}_{N,n,k}(t) = e^{i(N-n)\theta} \times \\ \left( \tilde{f}_n(t) J_{n-N}(\xi) \Psi_{JC,n}^+ + e^{-i\theta} \tilde{g}_{n+1}(t) J_{n+1-N}(\xi) \Psi_{JC,n+1}^- \right). \end{aligned} \quad (4.63)$$

El estado inicial que denotaremos por  $\Psi_G^-$  se obtiene de la ecuación anterior  $\Psi_G^- = \tilde{\Psi}_{N,n,k}(0)$ , es decir sustituyendo  $\tilde{\chi}_n(0) \rightarrow \chi_G^-$  de acuerdo a la condición inicial ec.(4.60). Se puede corroborar que en el límite  $g = 0$ ,  $\Psi_G^-$  se reduce al espinor de energía negativa dado por la ecuación (4.43), que corresponde al estado desacoplado de  $n + 1$  fotones y el grafeno libre en el estado de energía negativa. De forma similar, podemos definir el estado  $\Psi_G^+$  sustituyendo en la ec.(4.63)  $\tilde{\chi}_n(t) \rightarrow \chi_G^+$ , el cual en el límite  $g = 0$  correspondería al estado desacoplado de  $n + 1$  fotones y el grafeno libre en el estado de energía positiva. Los estados  $\Psi_G^+$  y  $\Psi_G^-$ , son ortogonales, en efecto se comprueba fácilmente que  $\langle \Psi_G^+ | \Psi_G^- \rangle = 0$ .

Consideremos el traslape de la función de onda  $\tilde{\Psi}_{N,n,k}(t)$  con los estados  $\Psi_G^\pm$ , definiendo

$$A_{n,k}(t) = \frac{1}{S} \langle \Psi_G^- | \tilde{\Psi}_{N,n,k}(t) \rangle, \quad B_{n,k}(t) = \frac{1}{S} \langle \Psi_G^+ | \tilde{\Psi}_{N,n,k}(t) \rangle, \quad (4.64)$$

donde  $S$  es la superficie del sistema. Notamos que al calcular los valores esperados en las ecuaciones anteriores con los mismos momentos  $k$  para las funciones  $\Psi_G^\mp$  y  $\tilde{\Psi}_{N,n,k}(t)$ , se obtiene un factor  $\delta(0)$  (ver ec.(4.45)), cantidad que en principio no está bien definida. Este aparente problema no se presenta si consideramos que el momento tiene una distribución  $\rho(k)$ , ec.(4.47). Sin embargo, a partir de la expresión para la delta:  $(2\pi)^2 \delta(\mathbf{k}) = \int d^2 r e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ , podemos hacer la siguiente identificación  $(2\pi)^2 \delta(0) = S$ . Con lo que obtenemos cantidades bien definidas para las expresiones en la ec.(4.64). Tomando en cuenta lo anterior y después de un cálculo detallado se obtienen las siguientes expresiones para la probabilidad de transiciones

$$\begin{aligned} |A_{n,k}(t)|^2 &= 1 + \frac{1}{2} \frac{\Omega_n^2}{\Lambda_n^2} (\cos(2\Lambda_n t) - 1) \\ |B_{n,k}(t)|^2 &= \frac{1}{2} \frac{\Omega_n^2}{\Lambda_n^2} (1 - \cos(2\Lambda_n t)). \end{aligned} \quad (4.65)$$

La autocorrelación  $|A_{n,k}(t)|^2$  representa la probabilidad de que al tiempo  $t$ , el estado de  $n$  fotones permanezca en el estado inicial  $\Psi_G^-$ . Mientras que

$|B_{n,k}(t)|^2$  nos da la probabilidad de transición al estado de energía positiva  $\Psi_G^+$ . En los casos que estudiaremos a continuación consideraremos el límite  $n \gg 1$ , con lo cual (ver ec.(4.51))  $\Omega_n \approx \Omega_n^R$ , y  $\Lambda_n = \frac{1}{2\hbar}(E_n^+ - E_n^-) \approx \sqrt{(\Omega_n^R)^2 + (v_f k)^2}$ .

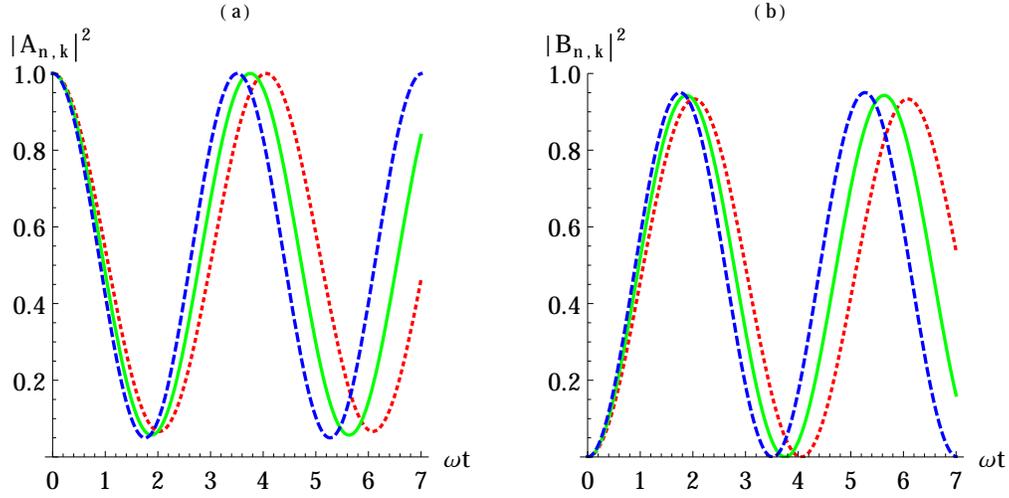


Figura 4.4: Evolución de la autocorrelación  $|A_{n,k}(t)|^2$  y la probabilidad de transición  $|B_{n,k}(t)|^2$ , ecs. (4.65), como función del tiempo normalizado  $\tau = \omega t$ . Se consideran los parámetros  $k' = 0.2$ ,  $g' = 0.1$  y  $n = 30$  para la línea punteada (roja),  $n = 40$  para la línea continua (verde) y  $n = 50$  para la línea de guiones (azul).

En la figura 4.4 presentamos gráficas que muestran la evolución temporal de  $|A_{n,k}(t)|^2$  y  $|B_{n,k}(t)|^2$ , consideramos varios valores para el número  $n$  de fotones, manteniendo  $k$  y  $g$  fijos. Observamos que las probabilidades muestran las oscilaciones características de Rabi, con una frecuencia  $2\Lambda_n$  que se incrementa conforme  $n$  aumenta.

La figura 4.5 muestra los resultados cuando  $n$  y  $g$  se fijan y se consideran tres valores diferentes para  $k$ . Notamos que a tiempos cortos ( $\Omega_n t \ll 1$ ) la excitación del estado  $\Psi_G^+$  crece como  $t^2$  y es independiente del momento  $k$ ,  $|B_{n,k}(t)|^2 \approx \Omega_n^2 t^2$ . Los máximos valores para la inversión de la población se dan en las resonancias  $t_R = (2m+1)\pi/2\Lambda_n$ , donde  $m$  es un entero. Por otro lado una inversión completa de la población en las resonancias  $|B_{n,k}(t_R)|^2 \rightarrow 1$ ,

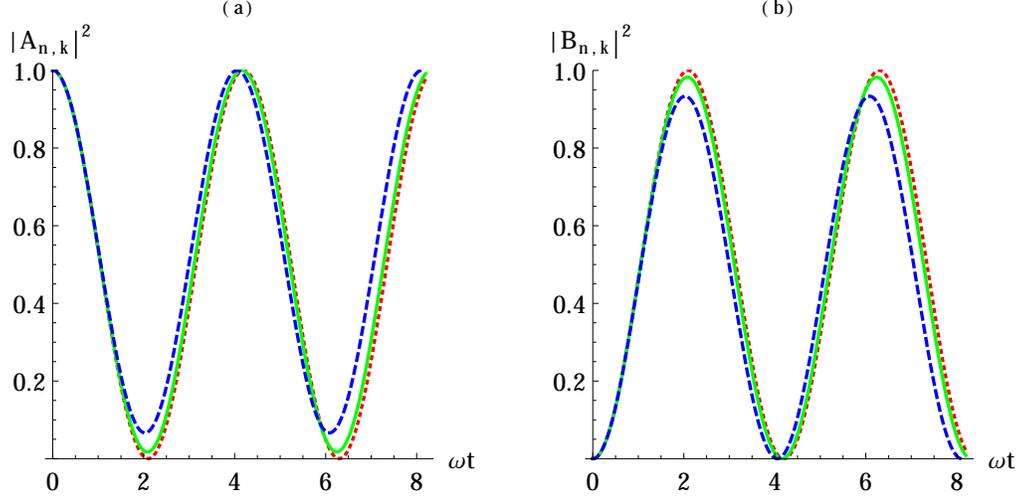


Figura 4.5: Evolución de la autocorrelación  $|A_{n,k}(t)|^2$  y la probabilidad de transición  $|B_{n,k}(t)|^2$ , ecs. (4.65), en función del tiempo normalizado  $\tau = \omega t$ . Los valores de  $n = 30$  y  $g' = 0.1$  permanecen fijos. Se consideran tres casos:  $k' = 0.01$  para la línea punteada (roja),  $k' = 0.1$  para la línea continua (verde), y  $k' = 0.2$  para la línea de guiones (azul).

sólo se da para  $k = 0$ , lo cual está de acuerdo con el hecho de que  $k$  es proporcional al desfaseamiento (*detuning*), que es la diferencia de energías  $2\hbar v_F k$  entre los niveles de energía  $\Psi_G^-$  y  $\Psi_G^+$ .

Es interesante notar que aún en el caso del vacío ( $n = -1$ ), hay una amplitud de transición no nula dada por

$$|B_{-1,k}(t)|^2 = \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{\omega^2 + 4v_F^2 k^2} \left( 1 - \cos \left( t \sqrt{\omega^2 + 4v_F^2 k^2} \right) \right). \quad (4.66)$$

#### 4.4.2. Colapsos y resurgimientos: distribución coherente de fotones $\rho(n, \bar{n})$

Supongamos que en lugar de un número fijo de fotones, el campo electromagnético corresponde a un estado coherente, el cual consiste de una superposición de estados  $|n\rangle$  pesados por una distribución de Poisson [88], es

decir

$$|\psi_{em}\rangle = \sqrt{\rho(n, \bar{n})} |n\rangle = e^{-\bar{n}/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{n}^{n/2}}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (4.67)$$

Para esta distribución, la probabilidad de encontrar el campo electromagnético en un estado  $|n\rangle$  está dada por  $|\langle n|\psi_{em}\rangle|^2 = \rho(n, \bar{n})$ . En este caso la función de onda del sistema de grafeno en interacción con el estado coherente de fotones toma la forma

$$\Psi_k(t) = \frac{1}{\sqrt{2N_T}} \sum_{N=-N_T}^{N_T} \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\rho(n, \bar{n})} \Psi_{N,n,k}(t). \quad (4.68)$$

Observamos que el estado  $\Psi_k(t)$  resulta de una superposición de estados con diferentes valores de  $N$  y  $n$ , sin embargo tenemos un valor definido para el momento  $k$ . Una cantidad de interés es la inversión de población, que se escribe como

$$W_k(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \rho(n, \bar{n}) (|A_{n,k}(t)|^2 - |B_{n,k}(t)|^2), \quad (4.69)$$

que resulta en la siguiente expresión

$$W_k(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \rho(n, \bar{n}) \left[ 1 + \frac{\Omega_n^2}{\Lambda_n^2} (\cos(2\Lambda_n t) - 1) \right]. \quad (4.70)$$

La aparición de colapsos y resurgimientos se muestra claramente en las figuras 4.6 y 4.7, donde se presenta la gráfica de  $W_k(t)$  como función del tiempo normalizado  $\tau = \omega t$ , para el caso de un estado inicial coherente. El resultado difiere considerablemente al compararlo con las oscilaciones de Rabi que se observan cuando el campo electromagnético es clásico o en el caso en que el número de fotones  $n$  está fijo (figs. 4.4 y 4.5). Para tiempos cortos se observan las oscilaciones de Rabi (fig. 4.6(b)), sin embargo conforme aumenta el tiempo la envolvente de las oscilaciones se colapsa a cero. Lo anterior se debe a que la frecuencia depende de  $n$ , por lo que las diversas componentes oscilan con frecuencias diferentes, que interfieren destructivamente produciendo el colapso observado. Adicionalmente se observa que a tiempos posteriores, (periodo de resurgimiento  $t_{rev}$ ) el paquete inicial reaparece de manera recurrente. Destacamos dos características: la amplitud de los pulsos se reduce en

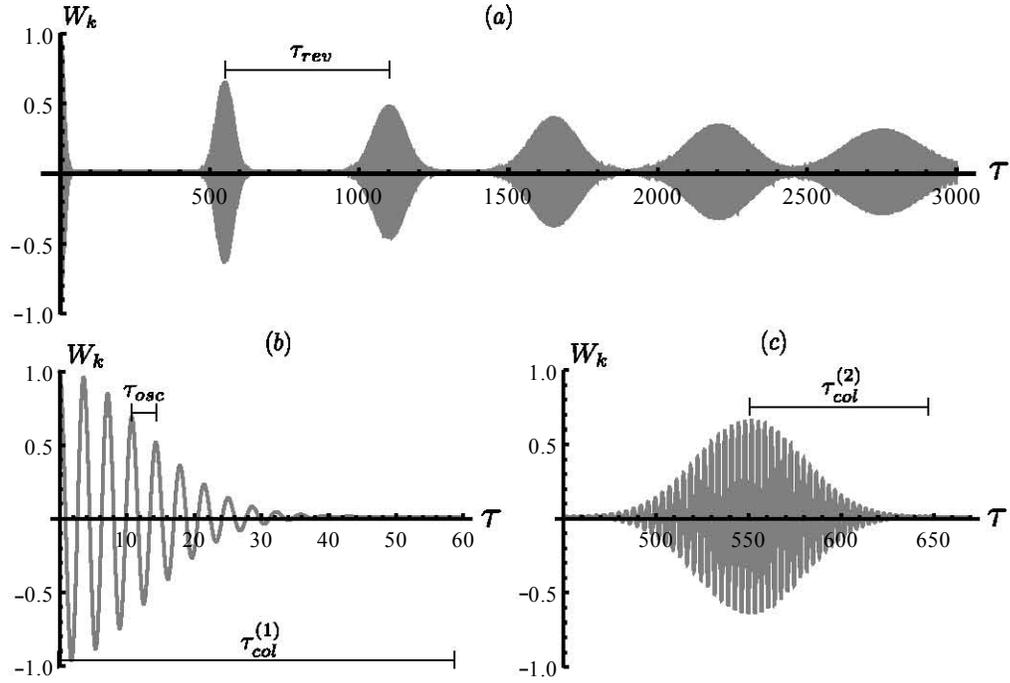


Figura 4.6: Inversión de población  $W_k$  como función del tiempo, en unidades adimensionales  $\tau = \omega t$  (ec.4.70). Los valores de los parámetros son:  $k' = 0.1$ ,  $g' = 0.1$  y  $\bar{n} = 50$ . En la gráfica (a),  $W_k(t)$  muestra varios paquetes equidistantes, separados por  $\tau_{rev} \sim 550$ . En la gráfica (b) se muestra una ampliación del primer paquete de la gráfica (a), los tiempos de oscilación y colapso están dados por  $\tau_{osc} \sim 3.6$  y  $\tau_{col}^{(1)} \sim 59$ . En la gráfica (c) se muestra una ampliación del segundo paquete de la gráfica (a), el tiempo de colapso está dado por  $\tau_{col}^{(2)} \sim 97$ . Los valores de los tiempos de oscilación, colapso y resurgimiento son consistentes con los valores calculados en las ecuaciones (4.71), (4.73) y (4.75).

los sucesivos resurgimientos, y la anchura de los pulsos aumenta, el tiempo característico de colapso  $t_{col}$  aumenta hasta que pulsos sucesivos se traslapan.

La dinámica asociada al fenómeno observado tiene tres escalas características. A tiempos cortos el periodo de oscilación de Rabi

$$t_{osc} = \frac{\pi}{\Lambda_{\bar{n}}}, \quad (4.71)$$

de acuerdo a la ec.(4.70), es determinado por el valor promedio del número

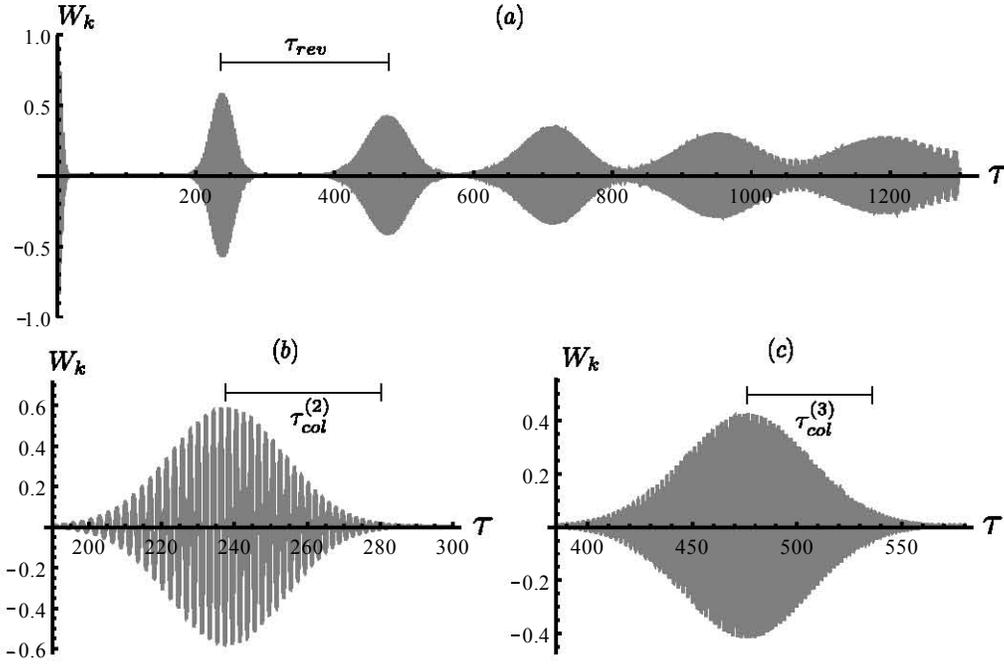


Figura 4.7: Inversión de población  $W_k$  como función del tiempo, en unidades adimensionales  $\tau = \omega t$  (ec.4.70). Los valores de los parámetros son:  $k' = 0.1$ ,  $g' = 0.2$  y  $\bar{n} = 50$ . En la gráfica (a),  $W(t)$  muestra varios paquetes equidistantes, separados por  $\tau_{rev} \sim 240$ . En la gráfica (b) se muestra una ampliación del segundo paquete en (a), el tiempo de colapso está dado por  $\tau_{col}^{(2)} \sim 42$ . En la gráfica (c) se muestra una ampliación del tercer paquete en (a), el tiempo de colapso está dado por  $\tau_{col}^{(3)} \sim 58$ . Los valores de los tiempos de colapso y resurgimiento son consistentes con los valores calculados en las ecuaciones (4.73) y (4.75). El efecto en el aumento al valor de  $g$  es acortar los periodos  $\tau_{rev}$  y  $\tau_{col}$ .

de excitaciones fotónicas de la distribución de Poisson. En la distribución de Poisson la desviación cuadrática media está dada por  $\Delta n = \sqrt{\bar{n}}$ . El periodo de colapso se determina por la condición de que los términos de la suma en ec.(4.70) correspondientes a las contribuciones  $n = \bar{n} \pm \sqrt{\bar{n}}$  se sumen fuera de fase, lo cual se puede expresar por la siguiente condición

$$2 (\Lambda_{\bar{n}+\sqrt{\bar{n}}} - \Lambda_{\bar{n}-\sqrt{\bar{n}}}) t_{col} = (2m + 1) \pi \quad m = 1, 2, 3, 4 \dots, \quad (4.72)$$

tomando en cuenta que para  $\bar{n} \gg 1$  se cumple que  $\bar{n} \gg \sqrt{\bar{n}}$ , se obtiene la

siguiente expresión para el periodo de colapso

$$t_{col}^{(m)} = \left( m + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi \Lambda_{\bar{n}}}{g^2 \sqrt{\bar{n}}}, \quad (4.73)$$

donde  $m = 1, 2, 3, \dots$  para los primer, segundo, tercer, ... colapsos, respectivamente.

El resurgimiento ocurre cuando términos sucesivos en la suma de la ec.(4.70) interfieren constructivamente, lo cual ocurre cuando la diferencia de fase entre dichos términos es igual a  $2\pi$ , es decir si se cumple la condición

$$2 (\Lambda_{\bar{n}+1} - \Lambda_{\bar{n}}) t_{rev} = 2\pi, \quad (4.74)$$

considerando  $\bar{n} \gg 1$ , nos permite obtener el periodo de resurgimiento como

$$t_{rev} = \frac{2\pi \Lambda_{\bar{n}}}{g^2}. \quad (4.75)$$

En las figuras 4.6 y 4.7 se señalan los periodos de oscilación de Rabi, de los colapsos y de los resurgimientos, los cuales coinciden con los periodos calculados a partir de las fórmulas en las ecuaciones (4.71), (4.73) y (4.75) respectivamente.

El hecho de que el tiempo de colapso se incrementa en cada uno de los pulsos resultantes de los resurgimientos, da lugar a que eventualmente exista un traslape entre los mismos, anulando con ello el efecto del colapso. Esto tiene lugar cuando la suma de los periodos de colapso para dos pulsos sucesivos es igual al periodo de resurgimiento, es decir  $t_{col}^{(m)} + t_{col}^{(m+1)} = t_{rev}$  lo cual da lugar a la siguiente relación  $m^* \approx \sqrt{\bar{n}} - 1$ . Este resultado indica que para  $\bar{n}$  suficientemente grande, el traslape entre pulsos aparece en el  $m^*$ -ésimo resurgimiento, independientemente del valor del momento  $k$  y del valor de la constante de acoplamiento  $g$ . Esto se comprueba al comparar las figuras 4.6 y 4.7, en ambos casos  $\bar{n} = 50$  y el traslape aparece a partir del sexto pulso, de acuerdo con la condición  $\sqrt{50} - 1 \approx 6$ , a pesar de que los valores de la constante de acoplamiento  $g$  son diferentes.

Para analizar el comportamiento de la corriente, calculamos las componentes  $x$  e  $y$  de la corriente tomando en cuenta que el operador de velocidad se obtiene a partir de las relación  $\hat{v}_l = i[H, x_l] = v_F \sigma_l$  con  $l = x, y$ . Utilizando la función de onda que incluye una distribución coherente de fotones ec.(4.68), podemos calcular las corrientes

$$J_l(t) = -\frac{e}{S} \langle \tilde{\Psi}_k(t) | \sigma_l | \tilde{\Psi}_k(t) \rangle, \quad (4.76)$$

donde  $l = x, y$ . Después de un detallado cálculo, y considerando el límite  $n \gg 1$  se obtienen las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} J_x(t) &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \rho(n, \bar{n}) \left[ \text{Re} \left( \tilde{g}_{n+1}^*(t) \tilde{f}_n(t) \right) + \sin(2\varphi_n) \left( |\tilde{g}_{n+1}(t)|^2 - \frac{1}{2} \right) \right] \\ J_y(t) &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \rho(n, \bar{n}) \text{Im} \left( \tilde{g}_{n+1}^*(t) \tilde{f}_n(t) \right). \end{aligned} \quad (4.77)$$

Estas expresiones se simplifican bastante si se consideran solamente los términos dominantes para la constante de acoplamiento  $g$  pequeña, es decir en el límite  $\gamma_n \ll 1$ , ec.(4.29), en cuyo caso obtenemos

$$\begin{aligned} J_x(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{k}{\Lambda_n} \rho(n, \bar{n}) \sin(2\Lambda_n t) \\ J_y(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{k \Omega_n}{\Lambda_n^2} \rho(n, \bar{n}) [1 - \cos(2\Lambda_n t)]. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Las expresiones para las corrientes  $J_x$  y  $J_y$  tienen una dependencia temporal similar a la de la función  $W_k(t)$ , por lo cual esperamos que su evolución temporal sea parecida. Las gráficas para las corrientes en la fig. 4.8 muestran que  $J_x$  y  $J_y$  evolucionan con colapsos y resurgimientos coincidentes, con periodos descritos por las ecuaciones (4.73) y (4.75).

### 4.4.3. Colapsos y resurgimientos: efectos de la distribución de momentos $\rho(k)$

En los casos analizados anteriormente consideramos que el momento tenía un valor único fijo  $k$ , sin embargo, en general esperamos que en el grafeno exista una distribución de valores para  $k$ . Esto se puede incorporar introduciendo la función de distribución de momentos  $\rho(k)$ , ec.(4.47).

Consideremos primero una configuración con un número fijo de fotones  $n$  y una distribución constante de valores para  $k$  entre el valor  $k = 0$  y un momento de corte  $k_c$ , es decir

$$\rho(k) = \frac{2}{k_c^2} \theta(k_c - k). \quad (4.79)$$

Considerando nuevamente las condiciones iniciales establecidas en las ecuaciones (4.60) y (4.62), la expresión anterior para  $\rho(k)$  corresponde a tener

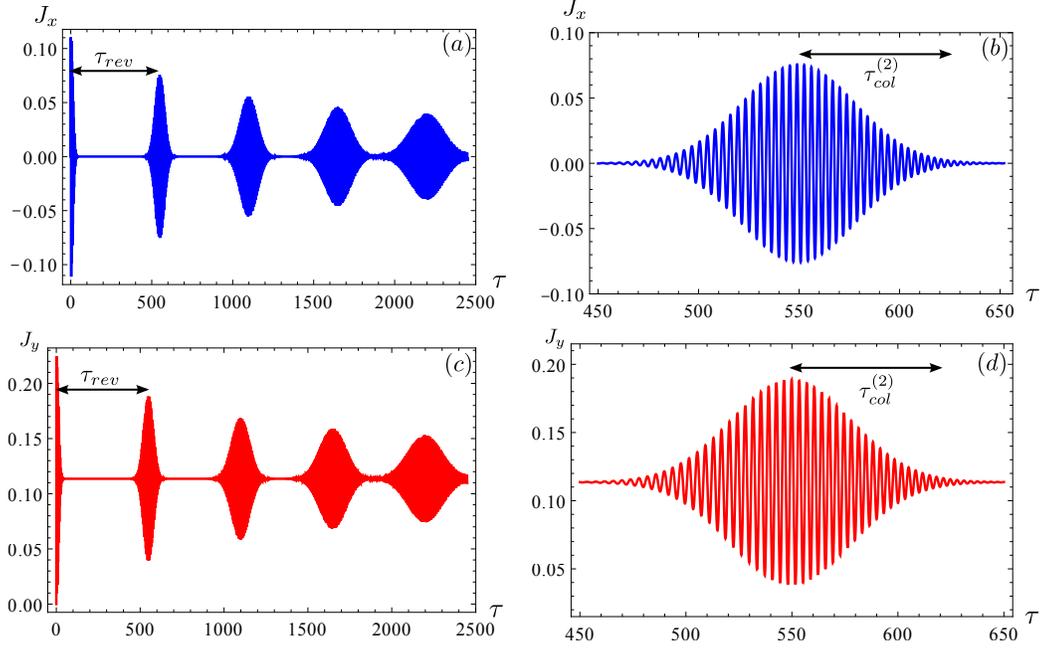


Figura 4.8: Dependencia temporal de las corrientes eléctricas: en la gráfica (a) se muestra  $J_x$  y en la gráfica (c) se muestra  $J_y$ , ambas en función de  $\tau = \omega t$  (4.78). Se han considerado los parámetros  $k' = 0.1$ ,  $g' = 0.1$  y  $\bar{n} = 50$ . En (b) se presenta una ampliación del segundo paquete en (a) y en (d) una ampliación del segundo paquete en (c).

inicialmente llenos los niveles de energía negativos, en el intervalo  $k = [0, k_c]$ . En este caso la función de onda se puede expresar como

$$\tilde{\Psi}_{N,n}^{(k_c)}(t) = \int \sqrt{\rho(k)} \tilde{\Psi}_{N,n,k}(t) k dk. \quad (4.80)$$

donde  $\tilde{\Psi}_{N,n,k}(t)$  está dada en la ec.(4.63).

Siguiendo procedimientos similares a los utilizados anteriormente, podemos calcular la inversión de probabilidad  $W_n^{(k_c)}(t)$ . La integral sobre el momento  $k$  se evalúa analíticamente, dando lugar al siguiente resultado

$$W_n^{(k_c)}(t) = 1 + \frac{2\Omega_n^2}{k_c^2} \left[ \text{Log} \left( \frac{\Omega_n}{\Lambda_n} \right) + Ci(2\Lambda_n t) - Ci(2\Omega_n t) \right], \quad (4.81)$$

donde  $Ci(x)$  representa la función coseno integral  $Ci(x) = -\int_x^\infty \frac{\cos t}{t} dt$  y  $\Lambda_n$  se evalúa en  $k = k_c$ , es decir  $\Lambda_n = \sqrt{\Omega_n^2 + (v_F k_c)^2}$ .

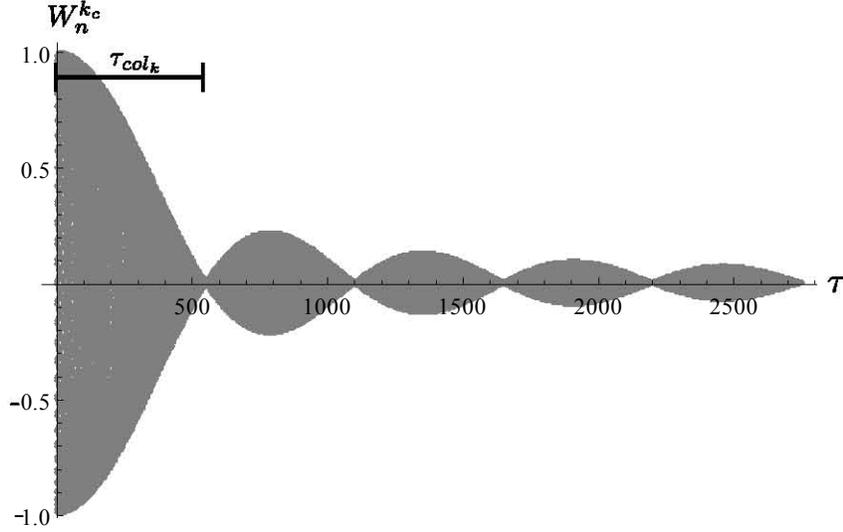


Figura 4.9: Inversión de población  $W_n^{k_c}$  en función del tiempo ec. (4.81). Se han considerado los siguientes parámetros:  $k' = 0.1$ ,  $g' = 0.1$  y  $n = 50$ . Puede verse que la amplitud se colapsa a cero con un periodo  $\tau_{col_k}$ . El periodo entre máximos de la distribución está determinado también por  $\tau_{col_k}$ . En este caso los colapsos son producidos por la interferencia entre diferentes valores del momento.

La figura 4.9 muestra la evolución temporal de la inversión de población  $W_n^{(k_c)}(t)$  para la selección de parámetros:  $g' = 0.1$ ,  $k'_c = 0.1$  y  $n = 50$ . El comportamiento es completamente diferente al que se presenta para las oscilaciones de Rabi, (figs. 4.4 y 4.5), mostrando la aparición de una serie de pulsos similares a los efectos de colapsos y resurgimientos, esto a pesar de que tenemos un número fijo de fotones  $n = 50$ .

El colapso de la amplitud ocurre en un tiempo del orden  $\tau \sim 500$ . La envolvente de la amplitud decrece conforme se incrementa el tiempo, sin embargo muestra claramente una sucesión de pulsos, seguidos de regiones de colapso del paquete de ondas. Esta situación es reminiscente de lo que observamos en el caso en que tenemos un estado coherente de fotones. Sin embargo ahora estamos sumando sobre diferentes valores del momento  $k$ ; la frecuencia de las diferentes componentes depende de  $k$ , por lo que interfieren destructivamente produciendo el colapso de la envolvente de la onda. De la figura observamos que la distancia entre los colapsos es igual a la distancia entre

los máximos relativos de la envolvente del paquete de ondas. Con base en lo anterior podemos calcular la localización de los tiempos  $t_{col_k}$  en los cuales ocurren los colapsos debidos a las interferencias entre las diferentes componentes de  $k$ . Calculamos la localización de los máximos de  $W_n^{(k_c)}(t)$  a partir de la condición

$$\frac{dW_n^{(k_c)}(t = t_{col_k})}{dt} \propto \frac{\cos(2\Lambda_n t_{col_k}) - \cos(2\Omega_n t_{col_k})}{t_{col_k}} = 0, \quad (4.82)$$

de donde determinamos  $t_{col_k}$  como

$$t_{col_k} = \frac{\pi}{\Lambda_n - \Omega_n} \approx \frac{2\pi\Omega_n}{k_c^2}, \quad (4.83)$$

donde se utilizó la condición  $k \ll \Omega_n$  para obtener el último término de la expresión anterior. En la figura se observa claramente que la posición de los tiempos de colapso así como los intervalos entre los máximos de las envolventes de los pulsos quedan determinados por el periodo  $t_{col_k}$ .

#### 4.4.4. Interferencia debida a la distribución de fotones $\rho(n, \bar{n})$ y de momentos $\rho(k)$

Consideremos ahora la inclusión simultánea de la distribución de momentos ec.(4.79) y un estado coherente de fotones descrito por la distribución de Poisson ec.(4.67). La función de onda es una extensión de la expresión en la ec.(4.68), agregando el promedio sobre  $\rho(k)$ , por lo que está dada como

$$\Psi^{(k_c)}(t) = \frac{1}{\sqrt{2N_T}} \sum_{N=-N_T}^{N_T} \sum_{n=0}^{\infty} \int \sqrt{\rho(n, \bar{n}) \rho(k)} \Psi_{N,n,k}(t) k dk. \quad (4.84)$$

Utilizando esta expresión para la función de onda podemos calcular la inversión de población, se tiene que

$$W^{(k_c)}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \rho(n, \bar{n}) W_n^{(k_c)}(t), \quad (4.85)$$

donde  $W_n^{(k_c)}(t)$  se obtiene de la ec.(4.81).

En la fig. 4.10(a), se muestra claramente la interferencia entre la modulación producida por el estado coherente de fotones y la distribución de

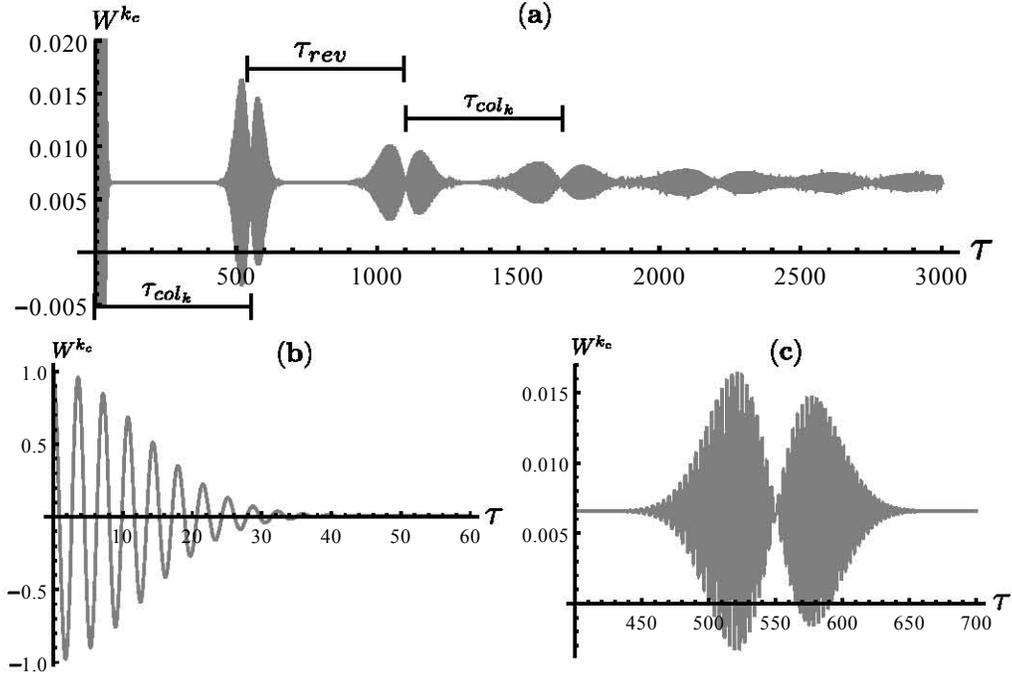


Figura 4.10: Gráfica de  $W^{k_c}$  en función del tiempo adimensional (4.85). Se han considerado los parámetros  $k'_c = 0.1$ ,  $g' = 0.1$  y  $\bar{n} = 50$ . En (a) vemos que los paquetes de onda centrados en múltiplos enteros de  $\tau_{rev}$  ahora aparecen seccionados debido a que  $\tau_{rev} \approx \tau_{col_k}$ , es decir, el máximo del paquete producido por la distribución coherente de fotones coincide con el mínimo proveniente de la distribución de momentos. En (b) tenemos una ampliación del inicio de la gráfica y en (c) tenemos una ampliación del segundo paquete donde se ve más claro que el paquete está seccionado.

momentos. Se seleccionan los parámetros  $k'_c = 0.1$ ,  $g' = 0.1$  y  $\bar{n} = 50$ . Se identifican una serie de pulsos, cuya posición central coincide con los de la figura 4.6, determinados por la expresión para el tiempo de resurgimiento  $t_{rev}$ , ec.(4.75) evaluado en  $k = k_c$ . Sin embargo, los pulsos están modulados de tal manera que la amplitud se cancela en la parte central. Esto se debe a que la selección  $k'_c = g' = 0.1$  implica  $t_{rev} \approx t_{col_k}$ , es decir la posición central de los pulsos producidos por los efectos coherentes del campo electromagnético ec.(4.75) coincide con el tiempo al cual los efectos de la distribución de momentos producen un colapso del paquete de ondas ec.(4.83), dando lugar a que cada pulso se divida en dos lóbulos, ver figura 4.10(c). En la Fig.

4.10(b) observamos las oscilaciones de Rabi para tiempos cortos, y también que conforme aumenta el tiempo el envolvente de las oscilaciones se reduce drásticamente, colapsando a cero al tiempo  $t_{col_k}$ . Aunque posteriormente resurgen los paquetes de onda, la amplitud de estos paquetes es mucho menor que la amplitud del paquete original.

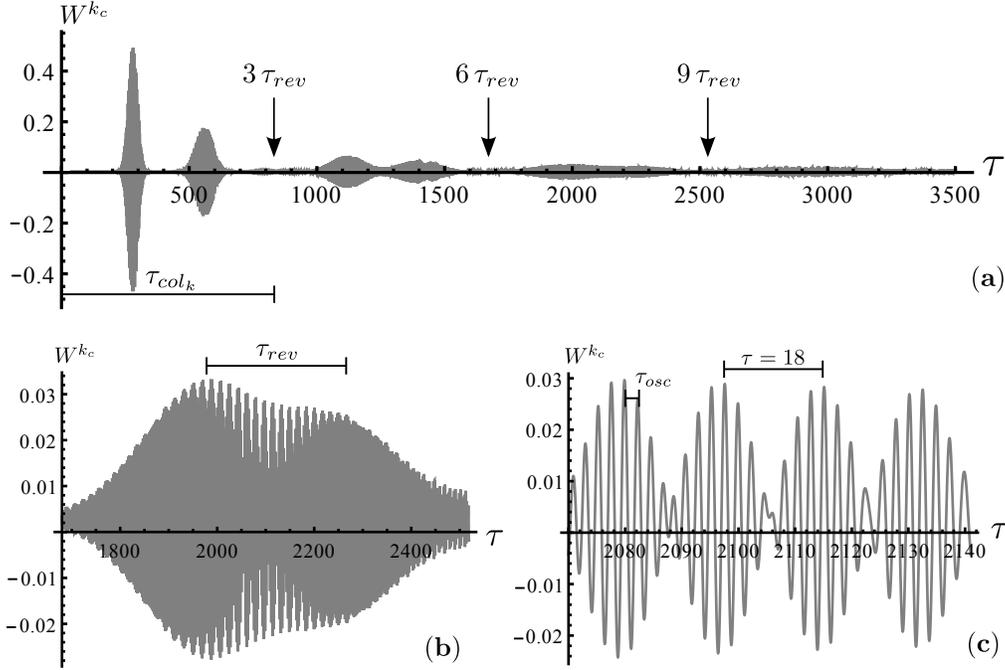


Figura 4.11: Inversión de población  $W^{k_c}$  en función del tiempo adimensional (4.85). Se han considerado los parámetros  $k'_c = 0.1$ ,  $g' = 0.173$  y  $\bar{n} = 50$ . En (a) las flechas verticales indican los periodos donde los resurgimientos deberían aparecer por efecto de los estados coherentes de fotones, sin embargo son suprimidos debido a la interferencia producida por la distribución de momentos. La gráfica (b) es una ampliación de la región comprendida entre  $6\tau_{rev}$  y  $9\tau_{rev}$ . La gráfica (c) es una ampliación de la parte central del paquete de onda en (b).

En la figura 4.11 se presentan resultados de la evolución temporal de  $W^{k_c}(t)$ , para los parámetros  $k'_c = 0.1$ ,  $g' = 0.173$  y  $\bar{n} = 50$ . Los periodos en unidades adimensionales  $\tau = \omega t$ , están dados por  $\tau_{rev} = 280$  y  $\tau_{col_k} = 840$ , notamos que se cumple la condición  $\tau_{col_k} = 3\tau_{rev}$ . Los efectos de interferencia son notoriamente más diversos e interesantes en este

caso. Observamos una serie de pulsos correspondientes a los resurgimientos producidos por la distribución coherente de fotones, estos aparecen en:  $\tau = \tau_{rev}, 2\tau_{rev}, 4\tau_{rev}, 5\tau_{rev}, 7\tau_{rev}, 8\tau_{rev}, 10\tau_{rev}$ . Pero notoriamente no aparecen los correspondientes a múltiplos de  $3\tau_{rev}$ , debido que coinciden con múltiplos de  $\tau_{col_k}$ , lo cual corresponde a regiones en las que el efecto de la distribución de momentos produce un colapso de los paquetes de onda.

En la figura 4.11(b) observamos una ampliación de los pulsos centrados alrededor  $\tau = 7\tau_{rev}$  y  $\tau = 8\tau_{rev}$ , adicionalmente aparecen otros pulsos que al ampliarse en la figura 4.11(c) se muestran como oscilaciones con periodo  $\tau_{osc} = 2$  moduladas por una envolvente de periodo  $\tau = 18$ .

## 4.5. Brecha de energía en $k = \omega/2v_F$

En las secciones anteriores nos hemos concentrado en el comportamiento de las cuasipartículas electrón-fotón en la región de momentos pequeños,  $k < \omega/2v_F$ . En particular la masa de estas cuasipartículas se determina por la brecha que se genera en el punto de Dirac. Tal y como se discutió en la sección 4.3, este es un efecto de segundo orden ( $g^2$ ), ya que se relaciona con un proceso virtual en que el electrón emite y reabsorbe un fotón generando una masa efectiva.

Sin embargo, también se observan brechas en el punto  $k = \omega/2v_F$ . Se puede seguir un procedimiento similar al presentado en la sección 4.3 para obtener una expresión aproximada para la relación de dispersión en esta región. Sólo comentamos los puntos esenciales. Anteriormente utilizamos el hecho de que el conjunto de ecuaciones (4.12) tiene una solución exacta en el punto de Dirac  $k = 0$ . Sin embargo observamos que también tiene una solución exacta si consideramos  $g = 0$ . En este caso los eigenvalores están dados por  $\epsilon_n^\pm = \hbar\omega n \pm \hbar v_F k$ . Es decir la relación de dispersión representa un conjunto de conos de Dirac desplazados por las réplicas de Floquet, que en este caso se relacionan al número  $n$  de fotones. El procedimiento es similar al considerado anteriormente.

- (1) Aplicamos al hamiltoniano completo la transformación que diagonaliza el hamiltoniano con  $g = 0$ .
- (2) Del hamiltoniano resultante observamos que en el punto  $k = \omega/2v_F$ , los cruces de energía se producen entre los estados  $\epsilon_{n-1}^+$  y  $\epsilon_n^-$ .
- (3) Nos restringimos al subespacio de estos dos estados, con lo cual obtenemos un conjunto de hamiltonianos desacoplados de dimensión  $2 \times 2$ , que se puede

diagonalizar dando como resultado los siguientes eigenvalores

$$E_n^\pm = \hbar\omega(n+1) \pm \hbar\sqrt{\frac{g^2(n+1)}{4} + v_F^2\left(k - \frac{\omega}{2v_F}\right)^2}. \quad (4.86)$$

En la figura 4.12 mostramos que para valores pequeños de la constante de acoplamiento, la expresión anterior coincide con los resultados numéricos que se obtienen de la solución de la ecuación de recurrencia completa. A partir del resultado anterior obtenemos el valor de la brecha en el punto  $k = \omega/2v_F$

$$\Delta_n = \hbar g \sqrt{(n+1)} \quad (4.87)$$

Es interesante observar que de manera similar a lo que se obtiene para la generación dinámica de la brecha en el caso de un campo electromagnético clásico [56, 89, 90], la brecha resulta ser lineal en la constante de acoplamiento, es decir es un proceso de primer orden producido por la transición resonante entre las bandas de valencia y conducción. Sin embargo a diferencia de los casos estudiados anteriormente, la brecha no es constante, sino que aumenta proporcionalmente a  $\sqrt{n+1}$ , al considerar estados con un mayor número de fotones. Otras propiedades de las cuasipartículas electrón-fotón cerca de la región  $k \sim \omega/2v_F$  se pueden estudiar de forma similar a lo que se hizo al considerar las soluciones cerca del punto de Dirac.

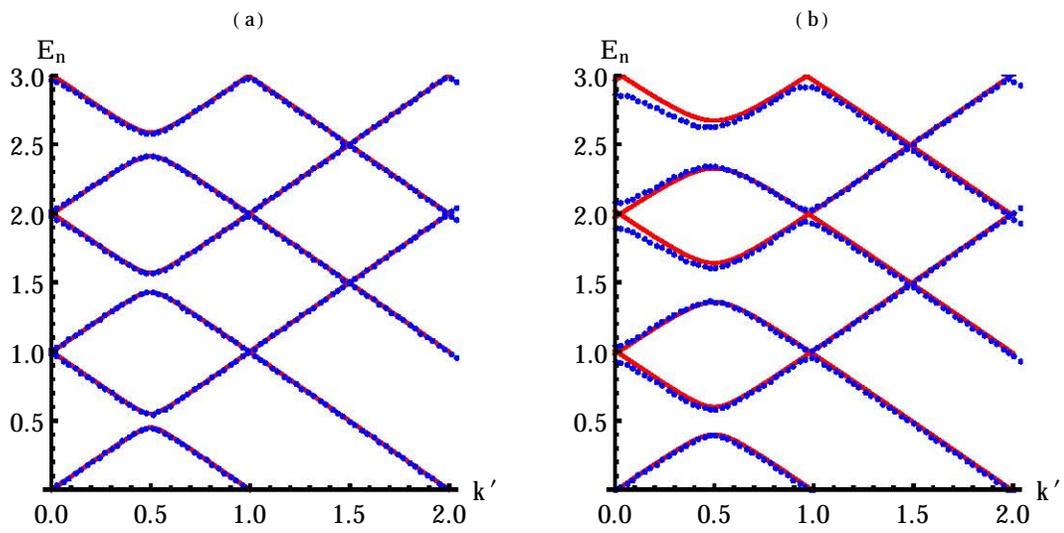


Figura 4.12: Espectro de energías en función de  $k'$  para la brecha al rededor de  $k = \omega/2v_F$  (ec. 4.86), se han considerado los parámetros  $g' = 0.1$  y  $n = 25$  en (a), para (b);  $g' = 0.2$  y  $n = 15$ . Se aprecia claramente que la aproximación funciona mejor cuando  $g'$  es pequeño.

# Capítulo 5

## Grafeno con campo magnético

En el primer capítulo mencionamos que las barreras electrostáticas no son aptas para confinar a los portadores de carga del grafeno debido al efecto de *tunelamiento* de Klein (paradoja de Klein) [28]. El efecto túnel de Klein tiene importantes implicaciones en el diseño futuro de dispositivos electrónicos basados en grafeno, debido a que los fermiones de Dirac sin masa no pueden confinarse de manera efectiva por barreras electrostáticas. En particular en el caso de incidencia normal la barrera se vuelve completamente transparente [91].

Una propuesta interesante consiste en la utilización de campos magnéticos no homogéneos [92]. Estudios previos examinaron diferentes configuraciones de barreras magnéticas: en el caso de pozos de potencial se han estudiado pozos cuadrados aislados [92], pozos dobles [93] y pozos múltiples cuadrados [94, 95, 96], así como el caso de funciones delta magnéticas [97].

Los estudios previos sobre barreras magnéticas en general consideran perfiles con fronteras abruptas. En esta tesis consideramos una barrera magnética en la que los bordes de la frontera se suavizan. Seleccionamos un campo magnético con un perfil hiperbólico y mostramos que la ecuación de Dirac correspondiente se puede analizar dentro del formalismo de la mecánica cuántica supersimétrica, lo cual conduce a un modelo que es exactamente soluble. Esto nos permite estudiar el espectro de estados ligados a detalle. Encontramos que para una barrera estrecha el espectro muestra una serie de bandas separadas por brechas, a medida que el ancho de la barrera magnética aumenta, las bandas evolucionan hacia los niveles de Landau degenerados. En el régimen de dispersión obtenemos una fórmula analítica sencilla para el coeficiente de transmisión, este resultado nos permite identificar condiciones

de resonancia en las cuales la barrera se vuelve transparente [98].

La utilización de campos magnéticos no homogéneos en el estudio de gases de electrones en estructuras semiconductoras bidimensionales (ESB) ha recibido mucha atención, tanto de forma experimental [99, 100, 101, 102, 103], como de forma teórica [99, 104, 105, 106, 107]. Se han podido crear campos magnéticos no homogéneos a través de varias configuraciones utilizando estructuras ferromagnéticas a escala micro, así como estructuras superconductoras depositadas encima de la estructura semiconductoras bidimensional. Se observaron interesantes fenómenos de transporte entre los que destacan: magnetorresistencia y oscilaciones commensurables, transporte anómalo a lo largo de direcciones especiales, etc.

La configuración para el campo magnético en la ecuación (5.16) se aproxima muy bien a la forma que tiene una barrera magnética producida por una película ferromagnética depositada sobre la estructura semiconductoras bidimensional (ESB) [100]. Aunque a la fecha no existe una construcción experimental de configuración similar en grafeno, su construcción parece inminente en el futuro cercano. De aquí esperamos que a parte del interés teórico por el problema mismo, nuestro análisis sea útil en el estudio experimental de confinamiento mediante campos magnéticos en grafeno.

## 5.1. Campo magnético uniforme

Para analizar el efecto de un campo magnético sobre los portadores de carga del grafeno, utilizamos la prescripción estándar para la interacción entre el campo y las partículas cargadas, a saber el acoplamiento mínimo. En el hamiltoniano libre  $H = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{p}$ , el operador de momento  $\hat{p}$  se sustituye por el momento covariante  $\boldsymbol{\pi} = \hat{p} + e\mathbf{A}$ , por lo que la dinámica está determinada por la solución de la ecuación de Dirac

$$H\Psi = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \Psi = E\Psi. \quad (5.1)$$

La presencia de un campo magnético  $\mathbf{B}$  introduce una escala de longitud en el problema  $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ , conocida como “longitud magnética”. Tomando en cuenta la velocidad de Fermi  $v_F$ , vemos que la frecuencia de ciclotrón  $\omega_c$  debe estar dada por  $\omega_c = \sqrt{2}v_F/l_B$ . El factor de  $\sqrt{2}$  se introduce por conveniencia.

Las componentes  $x$  e  $y$  del momento covariante no conmutan entre sí. El conmutador está dado por

$$[\pi_x, \pi_y] = ie\hbar B. \quad (5.2)$$

Esto implica que no se pueden diagonalizar al mismo tiempo  $\pi_x$  y  $\pi_y$ , a diferencia del caso libre donde sí es posible medir  $p_x$  y  $p_y$  simultáneamente.

Para el potencial vectorial elegimos la norma de Landau  $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = B(-y, 0, 0)$ , lo cual permite escribir la función de onda como  $\Psi(x, y) = e^{ikx}\phi(y)$ , donde  $\phi(y)$  es un espinor de dos componentes.

Utilizando los operadores  $\pi_x$  y  $\pi_y$  se pueden definir los operadores de un oscilador armónico unidimensional u operadores de escalera como

$$a = \frac{l_B}{\sqrt{2\hbar}}(\pi_x - i\pi_y) \quad \text{y} \quad a^\dagger = \frac{l_B}{\sqrt{2\hbar}}(\pi_x + i\pi_y). \quad (5.3)$$

En la representación de coordenadas estos operadores actúan sobre  $\phi(\zeta)$ , donde

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\partial_\zeta + \zeta), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\partial_\zeta + \zeta) \quad (5.4)$$

con  $\zeta = l_B k - y/l_B$ . Cabe hacer notar que los operadores de escalera cumplen con la regla de conmutación habitual  $[a, a^\dagger] = 1$  y el operador de número está dado por  $\hat{N} = a^\dagger a$ . Al aplicar estos operadores sobre estados propios del operador de número ( $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ ), puede verse que [108]

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (5.5)$$

Cabe destacar que  $a|0\rangle = 0$ . Lo anterior nos faculta para poder escribir un estado cualquiera  $|n\rangle$  en términos del estado de menor energía de la siguiente forma

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad (5.6)$$

Una vez que tenemos definidos los operadores de escalera, podemos escribir el hamiltoniano (5.1) en términos de estos operadores

$$H = \hbar\omega_c(a\sigma^+ + a^\dagger\sigma^-). \quad (5.7)$$

Una propiedad importante del grafeno que se mantiene en presencia de campos magnéticos, es la existencia de estados de energía cero  $\phi_0$ . Esto se puede comprobar del hamiltoniano anterior si pedimos que  $a\phi_0 = 0$  y  $\sigma^-\phi_0 = 0$ , lo cual se logra con el estado

$$|\phi_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix}, \quad (5.8)$$

que en la representación de coordenadas está dado por

$$\phi_0(\zeta) = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-\zeta^2/2} \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

Esto representa un estado de energía cero localizado en la subred A del grafo. Ahora bien, un estado arbitrario  $|\phi_{n,\pm}\rangle$  se obtiene aplicando el operador  $\hat{O}_{n,\pm}$  al estado base, es decir

$$|\phi_{n,\pm}\rangle = \hat{O}_{n,\pm}|\phi_0\rangle, \quad (5.10)$$

donde

$$\hat{O}_{n,\pm} = \left[ \frac{(1 - \sigma^- \sigma^+)}{2} \frac{a^\dagger}{\sqrt{n!}} \pm \sigma^+ \right] \frac{(a^\dagger)^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}}. \quad (5.11)$$

En efecto se comprueba de manera directa que  $H|\phi_{n,\pm}\rangle = \varepsilon_{n,\pm}|\phi_{n,\pm}\rangle$ , con los valores propios dados por

$$\varepsilon_{n,\pm} = \pm \hbar \omega_c \sqrt{n} = \pm \frac{\hbar v_F}{l_B} \sqrt{2n}. \quad (5.12)$$

Estos son los niveles de Landau para el caso relativista de masa nula. Debemos hacer énfasis sobre la diferencia entre la dependencia en el campo magnético del caso relativista donde la energía depende como la raíz cuadrada del campo magnético y el número cuántico  $n$ , es decir  $\sqrt{Bn}$ . Mientras que para los niveles de Landau no relativistas la dependencia es lineal tanto en  $B$  como en  $n$  [109].

En la representación de coordenadas encontramos que el estado  $|\Psi_{n,\pm}\rangle$  está dado por

$$\Psi_{n,\pm}(x, y) = e^{ikx} \begin{pmatrix} f_{n-1}(\zeta) \\ \pm f_n(\zeta) \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

donde recordamos que  $\zeta = \frac{y}{l_B} - l_B k$  y  $f_n(\zeta)$  corresponde a las soluciones del oscilador armónico unidimensional  $f_n(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\zeta^2/2} H_n(\zeta)$ , con  $H_n(\zeta)$  los polinomios de Hermite.

El espectro determinado por la ecuación (5.12) tiene varios elementos que merecen ser resaltados. Tal y como comentamos, incluye un nivel de energía cero. El espectro es simétrico respecto a  $\varepsilon_0$ ; por cada nivel de energía positivo  $\varepsilon_{n,+}$ , existe un nivel de energía negativo  $\varepsilon_{n,-}$ .

Adicionalmente notamos que el espectro de energía no depende del número

$k$ , esto significa que es degenerado respecto de  $k$ . La degeneración respecto a  $k$  se puede calcular suponiendo que el sistema se encuentra confinado en una superficie de lados  $L_x$  y  $L_y$ .

Imponiendo condiciones periódicas respecto a la dirección  $x$ , tenemos que  $kL_x = 2\pi j$ . Pero por otro lado la solución en (5.13), representa un oscilador armónico centrado en  $y_c = l_B^2 k$ , el cual debe estar dentro de la caja; es decir  $y_c < L_y$ . Por lo tanto la degeneración ( $N = j_{\max}$ ) está dada por

$$N = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2} = \frac{L_x L_y B}{h/e} = \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad (5.14)$$

donde  $\Phi_0 = h/e$  es el cuanto de flujo magnético. Es decir, la degeneración de cada nivel de Landau está dada por el número de cuantos de flujo magnético que se pueden acomodar en una caja de superficie  $L_x \times L_y$ .

Finalmente notamos que existe una degeneración extra de 2, por cada una de las orientaciones posibles de espín y otro factor de 2 por cada uno de los puntos de Dirac que son equivalentes. Por lo tanto

$$N_T = 4 \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (5.15)$$

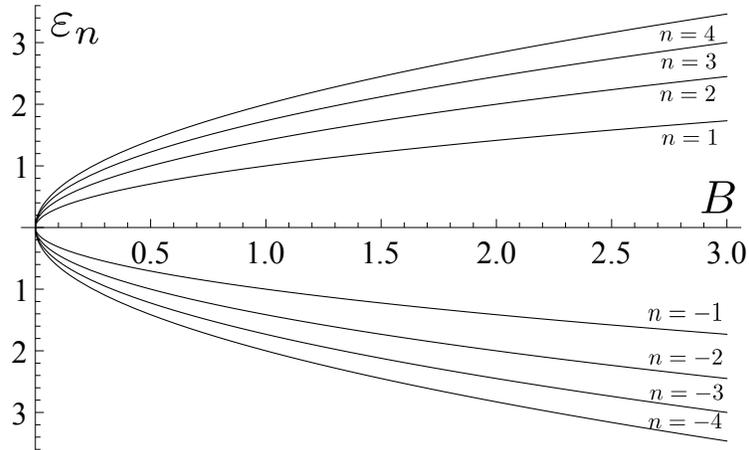


Figura 5.1: En esta gráfica se muestran los primeros niveles de Landau relativistas como función de  $B$ . El espectro de energía es de la forma  $\varepsilon_n \sim \sqrt{Bn}$

En la figura 5.1 se muestra el espectro de energías, como función de  $B$ , para una partícula de Dirac confinada a moverse en dos dimensiones en presencia de un campo magnético uniforme.

## 5.2. Barrera magnética con perfil hiperbólico

En esta sección analizaremos el problema de una barrera magnética cuyos bordes en la frontera son suaves. Una barrera de bordes suaves es en cierta manera más realista y cercana a condiciones experimentales. En particular elegir un perfil hiperbólico como el que analizamos aquí, además de asemejarse más a los perfiles que se pueden construir experimentalmente [100], tiene la ventaja de que la ecuación de Dirac bidimensional que describe este sistema se puede analizar mediante el formalismo de la mecánica cuántica supersimétrica y se puede resolver exactamente.

Consideremos un campo magnético no homogéneo que varía a lo largo de la dirección  $x$  y que apunta perpendicularmente al plano definido por la hoja de grafeno, su magnitud está dada por

$$B(x) = B_0 \operatorname{sech}^2 \left( \frac{x - x_0}{2d} \right). \quad (5.16)$$

Esta configuración representa una barrera magnética unidimensional como puede verse en la figura (Fig.5.2), donde  $B_0$  es la intensidad máxima del campo en el centro de la barrera y  $d$  es el ancho medio de la barrera. Notamos que en el límite  $d \rightarrow \infty$  recuperamos el caso de un campo magnético uniforme. En ocasiones puede ser conveniente utilizar como parámetro a  $\kappa = 1/d$ .

Para tener condiciones que sean relevantes físicamente en el grafeno, necesitamos que el campo magnético varíe suavemente respecto a la escala de espaciamiento de la red  $a = 0.246$  nm. Considerando que  $a \ll d$ , observamos que el ancho medio  $\Lambda \approx 3.25d$  y la *longitud de atenuación*  $|(1/B)(dB/dx)|^{-1} \geq d$  de la barrera magnética, satisfacen las condiciones requeridas.

Para el potencial vectorial seleccionamos la norma como  $\mathbf{A} = (0, A(x), 0)$ , donde

$$A(x) = 2B_0d \tanh \left( \frac{x - x_0}{2d} \right). \quad (5.17)$$

El campo magnético seleccionado permite obtener soluciones exactas de la ecuación de Dirac bidimensional, que describe la dinámica de portadores de carga en grafeno.

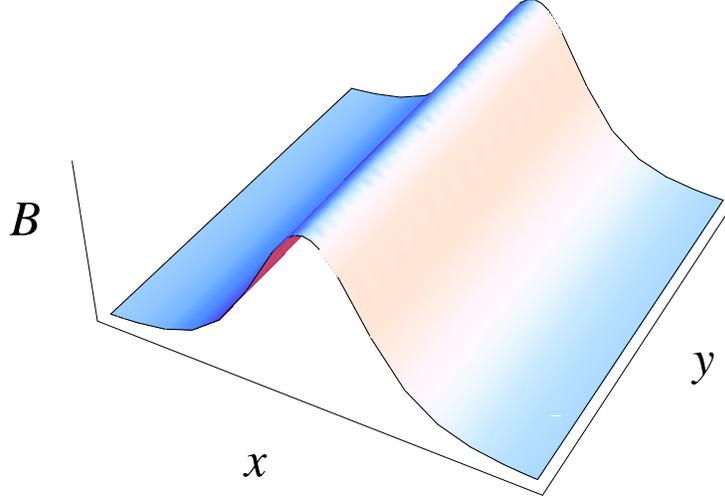


Figura 5.2: Barrera magnética con perfil hiperbólico a lo largo de la componente  $x$

### 5.2.1. Estados ligados

La ecuación de Dirac efectiva que describe la dinámica de portadores de carga en grafeno cerca de uno de los puntos  $K$  (ó  $K'$ ) de Dirac, sujeto al campo magnético dado por la ecuación (5.16) se escribe como

$$E \Psi(x, y) = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \Psi(x, y), \quad (5.18)$$

donde  $v_F$  es la velocidad de Fermi, el vector  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  incluye las matrices  $\sigma_x$  y  $\sigma_y$  de Pauli. Los operadores de momento covariantes están definidos como

$$\pi_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \pi_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + eA(x), \quad (5.19)$$

donde  $A(x)$  está especificada en la ecuación (5.17). Explícitamente la ecuación (5.18) toma la forma

$$E \Psi(x, y) = v_F \begin{pmatrix} 0 & \pi_x - i\pi_y \\ \pi_x + i\pi_y & 0 \end{pmatrix} \Psi(x, y). \quad (5.20)$$

Tomando en cuenta la invariancia ante traslaciones en  $y$ , proponemos una solución de la forma

$$\Psi(x, y) = \exp(ip_y y / \hbar) \phi(x), \quad (5.21)$$

donde  $\phi(x)$  es un espinor de dos componentes

$$\phi(x) = \begin{pmatrix} \phi_+(x) \\ \phi_-(x) \end{pmatrix}. \quad (5.22)$$

Esto produce el siguiente par de ecuaciones acopladas

$$\Delta\phi_+(\tilde{x}) = \left( -i\frac{\partial}{\partial\tilde{x}} - iW(\tilde{x}) \right) \phi_-(\tilde{x}) \quad (5.23)$$

$$\Delta\phi_-(\tilde{x}) = \left( -i\frac{\partial}{\partial\tilde{x}} + iW(\tilde{x}) \right) \phi_+(\tilde{x}), \quad (5.24)$$

donde hemos utilizado las variables adimensionales

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= x/l_B \\ \tilde{y} &= y/l_B \\ \kappa_y &= l_B k_y \\ \delta &= d/l_B \\ \Delta &= El_B/\hbar v_F, \end{aligned} \quad (5.25)$$

recordamos que la longitud magnética está dada como  $l_B = \sqrt{\hbar/eB_0}$ . Además la función  $W(\tilde{x})$  se define como

$$W(\tilde{x}) = \kappa_y + 2\delta \tanh\left(\frac{\tilde{x}}{2\delta}\right). \quad (5.26)$$

Combinando las ecuaciones (5.23) y (5.24) obtenemos un par de ecuaciones desacopladas

$$H_{\pm}\phi_{\pm}(\tilde{x}) = \left( -\frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + V_{\pm} \right) \phi_{\pm}(\tilde{x}) = \Delta^2\phi_{\pm}(\tilde{x}), \quad (5.27)$$

donde los potenciales efectivos  $V_{\pm}(\tilde{x})$  están dados por

$$V_{\pm}(\tilde{x}) = W^2 \pm \frac{dW}{d\tilde{x}} = \left( \kappa_y + 2\delta \tanh\left(\frac{\tilde{x}}{2\delta}\right) \right)^2 \pm \text{sech}^2\left(\frac{\tilde{x}}{2\delta}\right). \quad (5.28)$$

Es interesante observar que en presencia de campos magnéticos la ecuación de Dirac bidimensional tiene una estructura que permite el uso del formalismo de la mecánica cuántica supersimétrica [110]. Los potenciales  $V_+$  y  $V_-$  se

conocen como potenciales *supercompañeros* y se obtienen a partir de la función  $W$ , por medio de la relación (5.28). Las expresiones para  $V_{\pm}$  se conocen como potenciales de Rosen-Morse II [110] y sus ecuaciones de Schrödinger correspondientes son exactamente solubles.

Una característica importante de la mecánica cuántica supersimétrica es que las eigenfunciones y el espectro de energía de los hamiltonianos efectivos  $H_+$  y  $H_-$  están relacionados. En particular  $H_+$  y  $H_-$  tienen el mismo espectro para  $\Delta^2$ , excepto para el estado base.

Definiendo los siguientes operadores

$$L^{\pm} = -i \frac{d}{d\tilde{x}} \pm iW(\tilde{x}), \quad (5.29)$$

se vuelve más sencillo escribir la relación entre los espinores superior e inferior

$$\phi_+(\tilde{x}) = \frac{1}{\Delta} L^- \phi_-(\tilde{x}), \quad \phi_-(\tilde{x}) = \frac{1}{\Delta} L^+ \phi_+(\tilde{x}). \quad (5.30)$$

Ahora utilizamos el siguiente cambio de variable

$$\xi = \frac{1}{1 + e^{\tilde{x}/\delta}}. \quad (5.31)$$

Notar que  $\xi$  varía en el intervalo  $[0, 1]$ . El cambio de variable nos permite reescribir la ecuación (5.27) como

$$\left[ \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1 - 2\xi}{\xi(1 - \xi)} \frac{d}{d\xi} + \delta^2 \frac{\Delta - [\tilde{k}_y + 2\delta(1 - 2\xi)]^2 \pm 4\xi(1 - \xi)}{\xi^2(1 - \xi)^2} \right] \phi_{\pm} = 0, \quad (5.32)$$

La ecuación anterior tiene las soluciones asintóticas  $\phi_{\pm} \sim \xi^{\rho}$  cuando  $\xi \rightarrow 0$  ( $x \rightarrow \infty$ ) y  $\phi_{\pm} \sim (1 - \xi)^{\sigma}$  cuando  $\xi \rightarrow 1$  ( $x \rightarrow -\infty$ ) donde los valores de  $\rho$  y  $\sigma$  quedan determinados como

$$\rho = \delta \sqrt{(\kappa_y + 2\delta)^2 - \Delta^2}, \quad \sigma = \delta \sqrt{(\kappa_y - 2\delta)^2 - \Delta^2}. \quad (5.33)$$

Como mencionamos anteriormente, la componente superior e inferior del espinor están relacionadas mediante las ecuaciones (5.30).

En lo que sigue elegimos obtener primero la componente inferior y a partir de la primera relación en la ecuación (5.30) determinar la componente superior. Tomando en cuenta el comportamiento asintótico se propone el *ansatz* de la forma

$$\phi_-(\xi) = \xi^{\rho} (\xi - 1)^{\sigma} F_-(\xi). \quad (5.34)$$

Al sustituir en la ecuación (5.32) se encuentra que  $F_-(\xi)$  satisface la ecuación hipergeométrica, con dos posibles soluciones independientes:  $F_-(\xi) = F(\alpha, \beta, \gamma; \xi)$  y  $F_-(\xi) = \xi^{-2\rho} F(\alpha - \gamma + 1, \beta - \gamma + 1, 2 - \gamma; \xi)$ , donde  $F$  representa la función hipergeométrica. Sin embargo la segunda solución no tiene el comportamiento asintótico correcto, por lo cual se debe descartar. Por lo tanto la componente inferior del espinor queda como

$$\phi_-(\xi) = \xi^\rho (\xi - 1)^\sigma {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; \xi), \quad (5.35)$$

donde los coeficientes  $\alpha, \beta$  y  $\gamma$  quedan determinados como

$$\alpha = \rho + \sigma - 4\delta^2, \quad (5.36)$$

$$\beta = \rho + \sigma + 1 + 4\delta^2, \quad (5.37)$$

$$\gamma = 2\rho + 1. \quad (5.38)$$

La componente superior  $\phi_+$  se obtiene de la primera ecuación (5.30). Hecho esto, podemos escribir finalmente la solución completa

$$\Psi(\xi, y) = C e^{ik_y y} \xi^\rho (1 - \xi)^\sigma \left( \begin{array}{c} \frac{i}{\Delta \tilde{a}} [G(\xi) F(\alpha, \beta, \gamma; \xi) + \xi(1 - \xi) \frac{\alpha\beta}{\gamma} F(\alpha + 1, \beta + 1, \gamma + 1; \xi)] \\ F[\alpha, \beta, \gamma; \xi] \end{array} \right) \quad (5.39)$$

donde  $G(\xi) = [(\rho - 2\delta^2)(1 - \xi) - \xi(\sigma - 2\delta^2 - \kappa_y \delta)]$  y  $C$  es la constante de normalización.

Dado que  $H_+$  y  $H_-$  comparten los mismos valores propios, la existencia de estados ligados requiere que tanto  $V_+$  como  $V_-$  tengan forma de pozo. Esto sucede cuando

$$|\kappa_y| < 2\delta. \quad (5.40)$$

En la figura 5.3 se ejemplifica la validez de esta condición.

Cuando la condición (5.40) se cumple, el mínimo de los pozos de potencial se localiza en

$$\tilde{x}_c = 2\delta \operatorname{arctanh}(\kappa_y/2\delta) \quad (5.41)$$

Notemos que cuando  $\kappa_y = 0$  los potenciales son simétricos.

Para garantizar la convergencia de la solución (5.39) es necesario que alguno de los coeficientes de la función hipergeométrica  $\alpha$  ó  $\beta$  sea un entero negativo, digamos que  $\alpha = -n$  con  $n$  entero. Esta condición además de garantizar la convergencia de la solución, provee también la condición

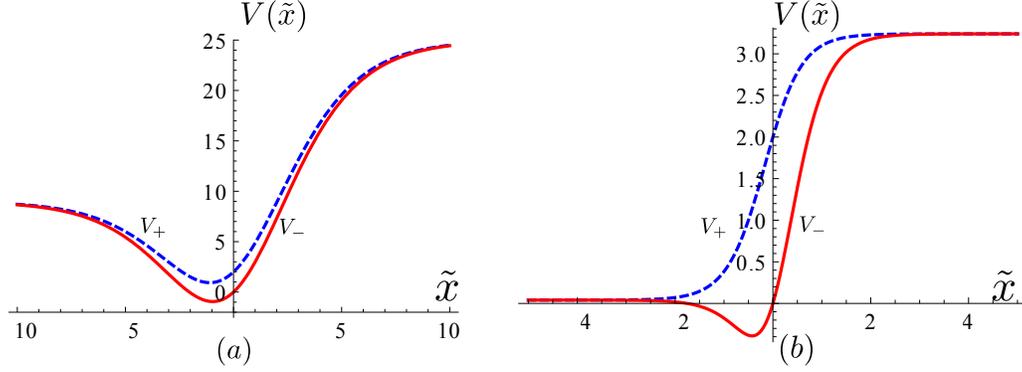


Figura 5.3: Gráficos de los potenciales efectivos  $V_+$  (línea de guiones) y  $V_-$  (línea continua) en función del parámetro  $\tilde{x}$ . En (a) los parámetros toman los valores  $\kappa_y = 1$  y  $\delta = 2$ , que satisfacen la condición de que los potenciales tengan ambos forma de pozos (5.40). En (b) los parámetros toman los valores  $\kappa_y = 1$  y  $\delta = 0.4$ , en este caso la condición (5.40) no se satisface y los potenciales efectivos no tienen la forma adecuada para tener estados ligados.

de cuantización para la energía. Combinando la condición  $\alpha = -n$  con las ecuaciones (5.33) y (5.36) se obtiene

$$\Delta = \pm \sqrt{2 \left( n - \frac{n^2}{8\delta^2} \right) \left[ 1 - \left( \frac{\kappa_y/2\delta}{1 - n/4\delta^2} \right)^2 \right]}. \quad (5.42)$$

Los valores de  $n$  y  $\kappa_y$  están restringidos por las condiciones

$$n_{\max} \leq 4\delta^2, \quad \kappa_{y,\max} \leq \frac{[4\delta^2 - n]^2}{8\delta^3}. \quad (5.43)$$

La primera condición determina el máximo nivel ligado permitido y evita una singularidad en la ecuación (5.42), mientras que la segunda condición determina los posibles valores de  $\kappa_y$  para un nivel  $n$  y está relacionada con el hecho de que la velocidad de grupo ( $|\partial E/\partial p_y|$ ) en grafeno debe ser menor que la velocidad de Fermi  $v_F$ . Ambas condiciones garantizan que  $\Delta < \min|V_{\pm}(\pm\infty)|$ , de tal manera que el electrón no se escape del pozo de potencial; de manera equivalente estas condiciones aseguran que los coeficientes  $\rho$  y  $\sigma$  (5.33) que determinan el comportamiento asintótico de la función de onda, cumplan con  $\rho, \sigma > 0$ .

La solución para el nivel de energía cero se obtiene directamente de resolver (5.23) y (5.24) con  $\Delta = 0$ ;

$$\Psi = C e^{ik_y y} \left[ \operatorname{sech} \left( \frac{\tilde{x}}{2\delta} \right) \right]^{4\delta^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.44)$$

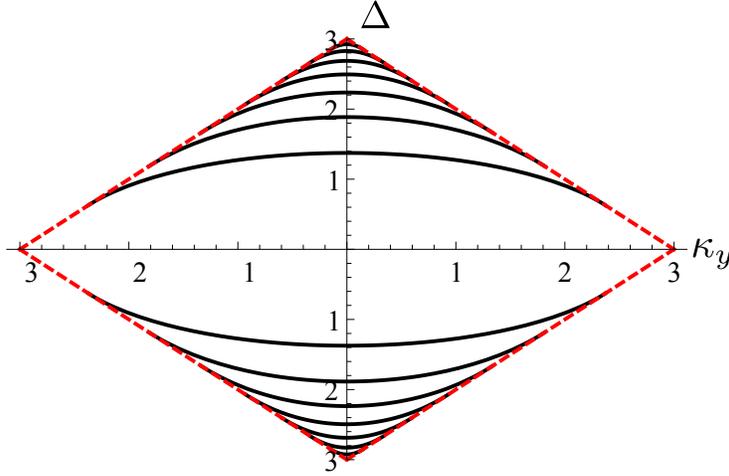


Figura 5.4: Espectro de estados ligados  $\Delta$ , como función del parámetro  $\kappa_y$  para una barrera de  $\delta = 1.5$ , de acuerdo a (5.43) el número de niveles permitidos es  $n_{\max} = 9$  y para cada nivel los valores de  $\kappa_y$  están delimitados por la energía de partícula libre  $\Delta = \pm\kappa_y$  (línea de guiones). En la figura se observan los 9 niveles con energía positiva y 9 con energía negativa, sin contar al nivel  $n = 0$ . Los niveles  $n = 7, 8, 9$  están muy cercanos y en particular el nivel  $n = 9$  consiste de un solo punto ( $\kappa_y = 0, \Delta = 3$ ).

La elección de uno de los parámetros de la función hipergeométrica como un entero negativo, además de darnos la condición de cuantización también nos permite escribir la solución (5.39) en términos de los polinomios de Jacobi como

$$\Psi = C e^{ik_y y} (1+z)^\rho (1-z)^\sigma \begin{pmatrix} \frac{i}{2\Delta d} [M(z) P_n^{(\gamma-1, -n+\beta-\gamma)}(z) - (1-z^2)^{\frac{\alpha\beta}{2n}} P_n^{(\gamma-1, 1-n+\beta-\gamma)}(z)] \\ P_n^{(\gamma-1, -n+\beta-\gamma)}(z) \end{pmatrix}, \quad (5.45)$$

donde  $M(z) = (\rho - 2\delta^2)(1 - z) - (\sigma - 2\delta^2)(1 + z) - 2\kappa_y\delta$  y  $z = 2\xi - 1$ .

La relación de dispersión (5.42) muestra que la inhomogeneidad del campo elimina la degeneración usual en los niveles de Landau. Para cada nivel  $n$  se tiene una dependencia en  $\kappa_y$ , lo cual da lugar a una velocidad de arrastre a lo largo del eje  $y$ . Esto es cierto excepto, para el nivel  $n = 0$ , que se mantiene como nivel de energía cero independientemente del valor de  $B$  y de  $\kappa_y$ .

El espectro de energía como función de  $\kappa_y$  se muestra en la figura 5.4 para el valor  $\delta = 1.5$ . Para los valores seleccionados se observan niveles con  $n \leq n_{max} = 9$ . Para cada valor de  $n$ , el nivel consiste de una banda que abarca desde  $\kappa_y = 0$  hasta un valor máximo  $\kappa_{y,max}$  dado por la segunda condición en (5.43).

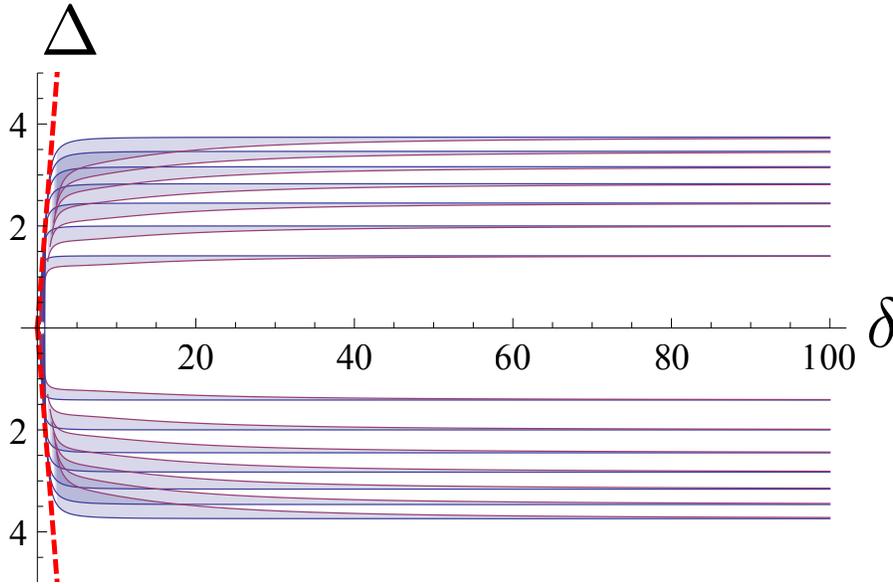


Figura 5.5: Espectro de energía  $\Delta$  como función de  $\delta = d/l_B$  para una barrera confinada en una caja cuadrada de área  $L \times L$ . El valor de  $\tilde{L} = L/l_B = 50$ . Las zonas oscuras representan los valores permitidos de energía. La línea de guiones  $\Delta = 2\delta$  acota el ancho mínimo necesario para que la barrera admita estados ligados. Para cada nivel  $n$  la componente transversal del momento varía entre  $\kappa_y = 0$  y  $\mathcal{K}_y$ .

Los resultados previos son válidos cuando el ancho de la barrera es pequeño comparado con las dimensiones del sistema. Veamos que pasa si cam-

biamos de una barrera angosta a una ancha. Consideremos que el sistema se encuentra confinado en una caja finita de tamaño  $L \times L$ , para una barrera angosta sabemos que los valores de  $\kappa_y$  están limitados por (5.43), pero si la barrera es ancha el número de estados permitidos está limitado por el número de estados que caben en la caja. Suponiendo condiciones periódicas para la función de onda en (5.45) en la dirección  $y$ , se tiene que  $\kappa_y = 2\pi j/\tilde{L}$  con  $j$  un entero y  $\tilde{L} = L/l_B$ .

Pero de acuerdo a (5.41),  $\kappa_y$  también determina la posición central del electrón, de ahí que  $\tilde{x}_c < \tilde{L}/2$  y el número de estados esté dado por  $N = j_{\max} = P.E. \cdot [(2\delta\tilde{L}/\pi)\tanh(\tilde{L}/4\delta)]$  donde  $P.E.$  es la parte entera. La restricción para el momento impuesta por el tamaño del sistema es  $\kappa_{y,\max}^L = 2\delta\tanh(\tilde{L}/4\delta)$ .

Es interesante observar que esta degeneración coincide con el número de cuantos de flujo magnético que atraviesan el sistema, es decir  $N = \Phi/\Phi_0$  donde el flujo total de campo magnético dado por la ecuación (5.16) se calcula como  $\Phi = (4\hbar/e)\delta\tilde{L}\tanh(\tilde{L}/4\delta)$  y  $\Phi_0 = h/e$  es el fluxón elemental.

Para poder seguir la evolución de la degeneración cuando el ancho de la barrera se modifica comparado con  $L$ , definimos

$$\frac{1}{\mathcal{K}_y} = \frac{1}{\kappa_{y,\max}^L} + \frac{1}{\kappa_{y,\max}^\delta} \quad (5.46)$$

$\mathcal{K}_y$  es un corte efectivo para el momento transversal. Se debe notar que  $\mathcal{K}_y$  interpola entre  $\kappa_{y,\max}^\delta$  en barreras estrechas y  $\kappa_{y,\max}^L$  cuando  $\delta > \tilde{L}$ . En la figura 5.5 se muestra el espectro de energías como función del ancho de la barrera. Para un nivel  $n$  el momento transversal permitido varía entre  $\kappa_y = 0$  y  $\kappa_y = \mathcal{K}_y$ , dando lugar a las bandas observadas en la figura. La restricción en  $n$  dada por (5.43) se traduce en una separatriz  $\Delta = 2\delta$ , las energías a la izquierda no están permitidas. Para valores pequeños de  $\delta$  se pueden observar unas pocas bandas y brechas para los primeros valores de  $n$ , seguidos por una región de espectro continuo que se extiende hasta el valor máximo  $n_{\max}$ . Cuando  $\delta$  se incrementa, tomando valores comparables con  $\tilde{L}$ , la anchura de las bandas disminuye. Finalmente en el límite de  $B$  homogéneo,  $\delta \gg \tilde{L}$ , los niveles de energía se reducen a los niveles de Landau observados en grafeno  $\Delta_{n,\kappa_y} = \pm\sqrt{2n}$  y la degeneración se reduce al resultado conocido  $N = \Phi/\Phi_0$  con  $\Phi = B_0L^2$ .

## 5.2.2. Dispersión

Para analizar el régimen de dispersión, consideremos una onda plana incidente desde  $x \rightarrow -\infty$  ( $\xi \rightarrow 1$ ), que incide con un ángulo  $\phi$  respecto al eje  $x$ . La elección de la norma (5.17) permite parametrizar el momento como

$$\kappa_x = \Delta \cos \phi \quad \kappa_y = \Delta \sin \phi + 2\delta \quad (5.47)$$

La onda transmitida tiene momento longitudinal  $\kappa'_x = \Delta \cos \phi'$ , donde  $\phi'$  es el ángulo refractado. La conservación de  $\kappa_y$  da la relación entre el ángulo incidente y el refractado como

$$\sin \phi' = \sin \phi + \frac{4\delta}{\Delta}, \quad (5.48)$$

mientras que la conservación de la energía nos permite relacionar los momentos longitudinales incidente y transmitido como

$$\kappa'_x = \sqrt{\kappa_x^2 - 8\delta\kappa_y}. \quad (5.49)$$

La ecuación (5.48) implica la existencia de un ángulo crítico

$$\phi_c = \arcsin \left( 1 - \frac{4\delta}{\Delta} \right) \quad (5.50)$$

a partir del cual no es posible la transmisión. Adicionalmente notamos que cuando se cumple la condición

$$\Delta \leq 2\delta, \quad (5.51)$$

la transmisión se anula sin importar el ángulo incidente  $\phi$ . Recordando la definición de las variables adimensionales en la ec.(5.25), notamos que esta condición establece que los estados con radio de ciclotrón promedio  $r_c = E/(eB_0v_F)$  menor que  $2d$ , serán doblados por el campo magnético y serán completamente reflejados.

Comparando las ecuaciones (5.33) y (5.47) observamos que los momentos longitudinales  $\kappa_x$  y  $\kappa'_x$  están relacionados a los coeficientes  $\rho$  y  $\sigma$  como sigue:  $\sigma = -i\kappa_x\delta$  y  $\rho = \delta\sqrt{-\kappa_x'^2}$ . Se verifica que si se cumple la condición (5.51),  $\rho$  es real, mientras que cuando (5.51) no es válida, reemplazamos  $\rho = -i\kappa'_x\delta$ . Utilizando las propiedades de la función hipergeométrica, se verifica que en

el límite  $x \rightarrow \infty$  ( $\xi \rightarrow 0$ ) la función de onda en (5.39) produce la expresión asintótica correcta

$$\Psi \sim e^{i(\kappa'_x \tilde{x} + \kappa_y \tilde{y})} \begin{pmatrix} se^{-i\phi'} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.52)$$

donde  $s = \text{sgn}E$ . El valor asintótico de la función de onda para  $x \rightarrow -\infty$  ( $\xi \rightarrow 1$ ), se obtiene utilizando fórmulas de transformación que relacionan  $F(\alpha, \beta, \gamma; \xi)$  con las funciones hipergeométricas evaluadas en  $1 - \xi$ , para obtener

$$\begin{aligned} \Psi \sim & e^{i(\kappa_x \tilde{x} + \kappa_y \tilde{y})} \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)} \begin{pmatrix} se^{i\phi} \\ 1 \end{pmatrix} \\ & + e^{i(-\kappa_x \tilde{x} + \kappa_y \tilde{y})} \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \begin{pmatrix} -se^{-i\phi} \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.53)$$

De esta ecuación se obtiene el coeficiente de reflexión

$$R = \left| \frac{\Gamma(\rho - i\kappa_x \delta + 4\delta^2 + 1)\Gamma(\rho - i\kappa_x \delta - 4\delta^2)}{\Gamma(\rho + i\kappa_x \delta + 4\delta^2 + 1)\Gamma(\rho + i\kappa_x \delta - 4\delta^2)} \right|^2, \quad (5.54)$$

donde se utilizaron las expresiones (5.36).

Cuando se cumple la condición (5.51)  $\rho$  es real, entonces  $R = 1$  y como se esperaba, el coeficiente de transmisión desaparece. Pero si la condición (5.51) no se cumple,  $\rho$  se sustituye por  $\rho = -i\delta\kappa'_x$  y la probabilidad de transmisión  $T = 1 - R$  se puede escribir en una forma simple como

$$T = \frac{\sinh(2\pi\kappa_x) \sinh(2\pi\kappa'_x)}{\sin^2(4\pi\delta^2) + \sinh^2(\pi[\kappa'_x + \kappa_x])}. \quad (5.55)$$

La fórmula anterior nos permite identificar condiciones resonantes en las que la barrera se vuelve transparente ( $T \sim 1$ ),

$$\delta = \frac{\sqrt{j}}{2}, \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (5.56)$$

En este caso la barrera actúa como un filtro asimétrico, se vuelve perfectamente transparente para ángulos en la región  $-\pi/2 < \phi < \phi_c$  (Fig.5.7). En particular, para valores de la energía ligeramente por arriba de la condición umbral (5.51),  $\Delta = 2\delta + \varepsilon$ , con  $\varepsilon \ll 1$ , la región de transparencia puede ser muy estrecha.

Por otro lado cuando se cumple la condición

$$\delta = \frac{\sqrt{j + \frac{1}{2}}}{2}, \quad j = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (5.57)$$

el valor del coeficiente de transmisión se atenúa. Cuando el valor de la energía está ligeramente por arriba de la condición umbral (5.51),  $\Delta = 2\delta + \varepsilon$ , con  $\varepsilon \ll 1$ , el coeficiente de transmisión es fuertemente atenuado (Fig.5.8).

En las siguientes gráficas observamos el comportamiento del coeficiente de transmisión en diferentes situaciones. En la primera gráfica (Fig.5.6) puede verse que para una energía de incidencia  $\Delta$  dada, existen regiones para las cuales todas las direcciones de incidencia comprendidas en esa región tienen transmisión  $T = 1$  y estas regiones son más amplias conforme disminuye el ancho de la barrera, como era de esperarse.

En la segunda gráfica (Fig.5.7) tomamos ahora una condición resonante  $j = 1$ , la cual al sustituir en (5.56) implica que  $\delta = 1/2$ . Es decir, tenemos un ancho de la barrera  $\delta$  fijo y vamos variando la energía de incidencia  $\Delta$ , vemos que las regiones en las que hay transmisión  $T = 1$  se hacen angostas al aumentar la energía de incidencia, es decir solo para direcciones de incidencia muy específicas hay transmisión.

En la tercera gráfica (Fig.5.8) buscamos minimizar el coeficiente de transmisión, para ello elegimos  $j = 0$  que al sustituir en (5.57) nos dice que  $\delta = 1/\sqrt{8}$ , entonces puede verse que eligiendo  $\Delta$  cercanas a 0.7 la transmisión se atenúa. Esto es, la barrera actúa como un filtro que solo permite direcciones y energías muy específicas.

De esta manera hemos visto que las barreras magnéticas pueden ser útiles para confinar portadores de carga del grafeno. En particular el perfil hiperbólico que propusimos tiene semejanzas con los que se han podido construir experimentalmente, pero también nos ha permitido un análisis muy completo tanto de estados ligados y niveles de Landau así como del régimen de dispersión, con lo que esperamos que este trabajo pueda ser útil en el estudio experimental del confinamiento de portadores de carga en grafeno mediante campos magnéticos.

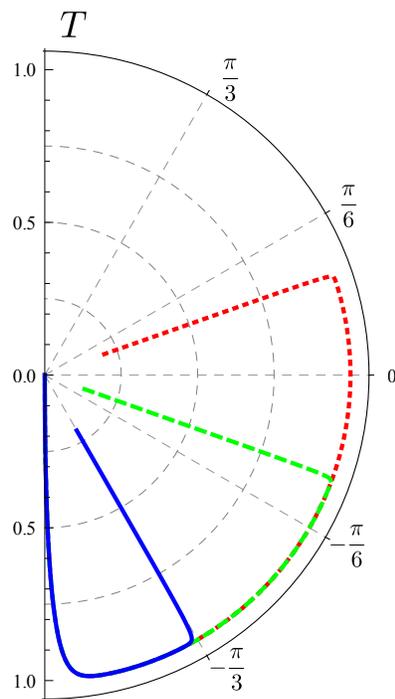


Figura 5.6: Coeficiente de transmisión para una energía dada de la partícula incidente  $\Delta = 3$  en función del ángulo de incidencia. En las tres curvas tomamos diferentes anchos de la barrera;  $\delta = 0.5$  línea punteada,  $\delta = 1$  línea de guiones y  $\delta = 1.4$  línea continua.

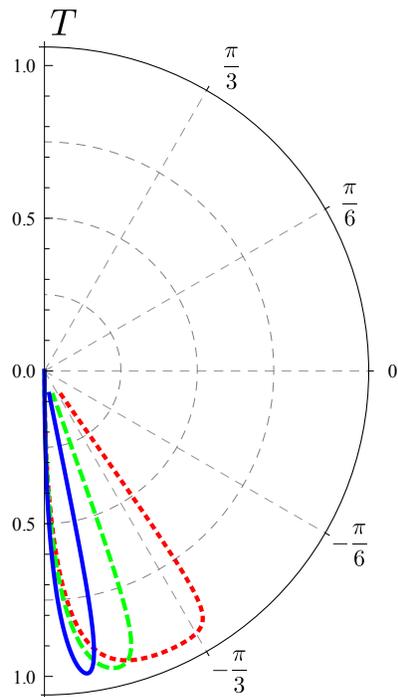


Figura 5.7: Coeficiente de trasmisión en función del ángulo de incidencia para un ancho medio de la barrera dado  $\delta = 1/2$  y consideramos tres energías de incidencia distintas  $\Delta = 1.01$  línea continua,  $\Delta = 1.03$  línea de guiones y  $\Delta = 1.1$  línea de puntos.

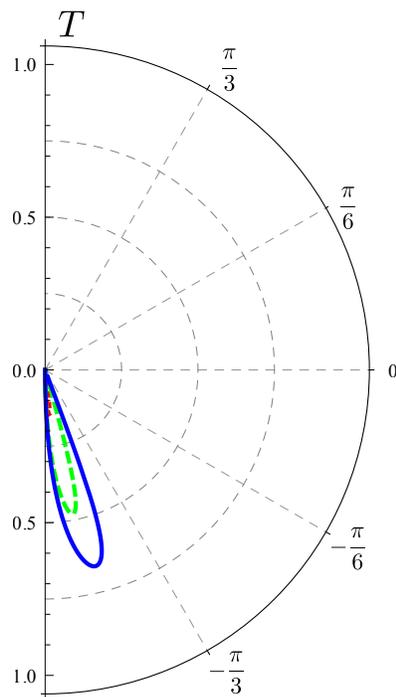


Figura 5.8: Coeficiente de transmisión en función del ángulo de incidencia. Damos un ancho de la barrera  $\delta = 1/\sqrt{8}$  y energías de incidencia  $\Delta = 0.71$  línea de puntos,  $\Delta = 0.72$  línea de guiones y  $\Delta = 0.73$  línea continua.

# Capítulo 6

## Conclusiones

En esta tesis nos propusimos estudiar la dinámica de los portadores de carga del grafeno en interacción con campos electromagnéticos. Pusimos especial énfasis en analizar aspectos análogos a los que aparecen en la electrodinámica cuántica, a los que llamamos fenómenos pseudorelativistas. Estos fenómenos se originan en el hecho de que la dinámica de los portadores de carga a bajas energías se puede modelar por la ecuación de Dirac para partículas de masa nula.

Al considerar el caso del campo eléctrico constante en el régimen lineal (campo eléctrico débil), encontramos que la corriente eléctrica es dominada por la contribución de polarización la cual se identifica con el efecto de Zitterbewegung. La corriente está caracterizada por la conductividad  $\sigma = e^2/4\hbar$ , ec.(2.70), la cual coincide en orden de magnitud con el valor observado para la conductividad mínima del grafeno.

Para analizar el régimen no-lineal del campo eléctrico constante utilizamos el formalismo de Magnus, el cual combinamos con un par de transformaciones unitarias, que permitieron escribir la ecuación de evolución en una forma resonante. La contribución dominante proviene de la región cercana al punto de Dirac móvil, el cual corresponde al punto donde se anulan los eigenvalores instantáneos de la energía. El formalismo permite obtener una convergencia mucho mas rápida de la expansión, lo cual comprobamos al comparar con los resultados numéricos exactos. El formalismo de Magnus nos permitió obtener una expresión analítica explícita para la producción de pares electrón-hueco como función del tiempo  $n(t)$ . Encontramos que existen dos regímenes separados por el tiempo de Schwinger  $t_S$ . Para tiempos cortos  $t < t_S$  la producción de pares tiene una dependencia cuadrática tanto en el

tiempo como en el campo eléctrico. Mientras que para  $t > t_S$  la producción de pares es lineal en el tiempo y tiene una dependencia  $E_0^{3/2}$  en el campo eléctrico. El último resultado coincide con la predicción de Schwinger ecs. (2.4,2.55) para la tasa de producción de pares por un campo eléctrico, en el caso de fermiones de masa cero en sistemas bidimensionales. En el régimen no-lineal la corriente eléctrica está dominada por la contribución de conducción y es proporcional a la densidad del número de pares electrón-hueco  $n(t)$  ec.(2.72), por lo cual muestra la misma dependencia temporal que  $n(t)$ .

Al estudiar el grafeno en interacción con una onda electromagnética clásica, consideramos inicialmente el caso de polarización lineal. En el límite en el que los portadores de carga se propagan paralelamente a la dirección de polarización de la onda obtuvimos una solución analítica explícita ec.(3.4). Para analizar el caso general utilizamos el formalismo de Floquet para determinar numéricamente el espectro de cuasienergías. Encontramos que en el punto de Dirac  $\kappa = 0$  no se generan brechas, es decir se preservan los cruces exactos. Para otros valores del momento  $\kappa$  se observa una alternancia de brechas resultado de cruces evitados con cruces exactos. Estos resultados se pueden entender ya que es posible definir un operador de paridad que conmuta con el hamiltoniano ec.(3.15). Los estados con una misma simetría se mezclan por efecto de la interacción en el punto de cruce, dando lugar a una brecha. Pero en el caso de cruces de niveles caracterizados por diferentes números cuánticos, la simetría preserva los cruces exactos; esto es precisamente lo que sucede en el punto de Dirac  $k = 0$ .

También mostramos que el sistema se puede analizar por medio del formalismo de Magnus-Floquet. Utilizando este formalismo determinamos la corriente eléctrica inducida por la onda electromagnética con polarización lineal. Corroboramos que los efectos no-lineales dan lugar a la generación de armónicos impares de orden mayor. Adicionalmente calculamos los campos de radiación inducida, lo cual nos permitió estimar el orden de magnitud de la intensidad de la radiación para el primer y tercer armónico.

En el caso de irradiación por una onda circularmente polarizada encontramos que siempre se produce una brecha en los puntos de Dirac  $\kappa = 0$ , la cual se puede calcular de forma exacta ec.(3.44). Adicionalmente observamos que conforme aumenta el valor del acoplamiento  $\lambda$ , se abren sucesivamente brechas en los siguientes puntos de cruce.

Al estudiar la interacción del grafeno con un campo electromagnético cuantizado, identificamos cantidades conservadas, las cuales fueron útiles para construir una representación adecuada de la función de onda del sistema

y determinar un conjunto de ecuaciones de recurrencia, cuya solución determina el espectro y otras propiedades del sistema.

En la región de valores pequeños del momento y de la constante de acoplamiento, el espectro consiste de una serie de bandas separadas. Implementamos un método que nos permitió encontrar una solución analítica aproximada, en la que el hamiltoniano se reduce a un conjunto de matrices de dimensión  $2 \times 2$  desacopladas, observamos que ajusta muy bien al comparar con el resultado numérico que se obtiene al resolver el sistema de ecuaciones de recurrencia.

Uno de los resultados más importantes de este análisis es que cuando el grafeno es irradiado por una onda electromagnética polarizada circularmente se generan estados ligados electrón-fotón, que representan cuasipartículas masivas con una relación de dispersión relativista (4.53). Las propiedades de estas cuasipartículas masivas fueron discutidas en detalle, en particular el estado correspondiente a la energía  $E_n^\pm$ , está formado por la superposición de estados de  $n$ ,  $n + 1$  y  $n + 2$  fotones.

El contar con una solución analítica explícita nos permitió estudiar en detalle la evolución temporal de paquetes de onda. Primeramente consideramos el caso en el que el momento  $k$  y el número de fotones  $n$  tienen un valor fijo. En este caso la evolución temporal de las amplitudes de autocorrelación y la amplitud de transición muestran la conocidas oscilaciones de Rabi.

A continuación consideramos el caso en el que se mantiene fijo el valor del momento  $k$ , pero el campo electromagnético corresponde a un estado coherente de fotones, descrito por una distribución de Poisson. Al estudiar la inversión de población encontramos que la evolución temporal muestra la aparición de una sucesión de colapsos en la amplitud de la onda; seguidos de resurgimientos en los paquetes de ondas. Encontramos un buen acuerdo entre las expresiones obtenidas para los periodos de colapso  $t_{col}$  y resurgimientos  $t_{rev}$  con los resultados mostrados en las gráficas. Los mismos fenómenos se observan en la evolución de la corriente eléctrica.

Considerando nuevamente un número fijo de fotones  $n$ , pero en este caso con una distribución de momentos representada por una función escalón, donde  $k \in [0, k_c]$ , la evolución temporal de la inversión de población muestra un patrón de colapsos y resurgimientos de los paquetes de onda. En este caso los colapsos no son extendidos y su periodo  $t_{col_k}$  coincide con el periodo entre resurgimientos sucesivos, lo cual nos permitió obtener una expresión explícita para dicho periodo.

Finalmente consideramos el efecto combinado de la luz coherente con la

distribución de momentos. Los efectos de interferencia son notoriamente más diversos e interesantes. Se encuentra toda una estructura novedosa, como resurgimientos seccionados o suprimidos dependiendo de los valores de los parámetros. Lo anterior es resultado de la interferencia entre la modulación producida por el estado coherente de fotones y la distribución de momentos.

En el último capítulo estudiamos al grafeno en interacción con un campo magnético en forma de barrera con un perfil suave tipo hiperbólico. Las ecuaciones de Dirac que describen el problema se pueden analizar dentro del formalismo de la mecánica cuántica supersimétrica. Encontramos una solución analítica compacta para la función de onda de los portadores de carga así como una fórmula para sus eigenvalores. El número de estados ligados está limitado por el ancho de la barrera y el espectro pierde la degeneración característica de los estados de Landau respecto al momento  $k_y$ . Analizamos cómo a medida que la barrera se vuelve más ancha se recuperan los niveles de Landau relativistas, incluyendo la degeneración respecto a  $k_y$ .

Al estudiar el problema de dispersión obtuvimos una fórmula compacta para el coeficiente de transmisión, esto nos permitió identificar condiciones resonantes en las que la barrera se vuelve transparente. Sin embargo, en general encontramos que la barrera puede actuar como filtro ya que solo energías y direcciones específicas de los electrones incidentes pueden atravesarla.

Los resultados de esta tesis dejan abiertas varias interrogantes y la posibilidad de un número importante de temas de estudio a futuro. Las técnicas presentadas para analizar la interacción del grafeno con campos dependientes del tiempo, que dan en algunos casos lugar a la generación de brechas de energía, podrán ser utilizadas para estudiar la dinámica de los estados de borde. Esto resulta de interés con respecto al tema surgido recientemente de los llamados aislantes topológicos de Floquet.

Por otro lado será interesante analizar con más detalle diversos aspectos de la interacción del grafeno con un campo electromagnético cuantizado. Aparte de estudiar las condiciones que se requieren para observar experimentalmente los efectos descritos, sería interesante analizar el problema de la generación de armónicos de orden superior en este contexto. En particular en relación al estudio del problema del mezclado de cuatro ondas, con la finalidad de generar fotones correlacionados.

En cuanto al tema de la dinámica del grafeno en presencia de barreras magnéticas, esperamos que este trabajo pueda ser útil en el estudio experimental del confinamiento de portadores de carga en grafeno mediante campos magnéticos.

# Apéndice A

## Método de álgebras de Lie

En este apéndice vamos a explicar como se implementa el método de álgebras de Lie para resolver de forma exacta (numéricamente) la ecuación de evolución para los portadores de carga del grafeno en presencia de un campo electromagnético. Esto nos permitirá comparar con el resultado obtenido a partir de la aproximación de Magnus. El método se puede utilizar para una dependencia temporal arbitraria, pero en particular se aplicará al caso de un campo eléctrico constante, en cuyo caso el potencial vectorial crece linealmente con el tiempo.

El método de álgebras de Lie se ha utilizado en diferentes contextos, en particular es útil para encontrar la solución exacta numérica al problema de un átomo de dos niveles que interactúa con un campo electromagnético clásico [111].

Consideremos el hamiltoniano de la ec.(2.35). Utilizando la definición de los operadores  $\sigma_{\pm} = \sigma_1 \pm i\sigma_2$ , tenemos que el hamiltoniano se puede escribir como

$$H_Q = -\frac{\kappa_y}{4\epsilon^2} (e^{i2\alpha(\tau)}\sigma_+ + e^{-i2\alpha(\tau)}\sigma_-). \quad (\text{A.1})$$

Identificamos las funciones  $\phi(\tau)$  como

$$\phi(\tau) = -\frac{\kappa_y}{4\epsilon^2} e^{i2\alpha(\tau)}, \quad \phi^*(\tau) = -\frac{\kappa_y}{4\epsilon^2} e^{-i2\alpha(\tau)}. \quad (\text{A.2})$$

Lo anterior nos permite escribir el hamiltoniano (A.1) de la siguiente manera

$$H_Q = \phi(\tau)\sigma_+ + \phi^*(\tau)\sigma_-. \quad (\text{A.3})$$

El conjunto de operadores  $\{\sigma_+, \sigma_-, \sigma_z\}$  forma una álgebra de Lie, lo cual nos permite escribir la solución para el operador de evolución de la ec.(2.35) como

un producto de exponenciales de la forma [112]

$$U = e^{x(\tau)\sigma_+} e^{y(\tau)\sigma_-} e^{z(\tau)\sigma_z}. \quad (\text{A.4})$$

Las funciones que parametrizan al operador de evolución vienen dadas por las soluciones del siguiente sistema de ecuaciones diferenciales acopladas [111]

$$\frac{dx}{d\tau} = \frac{-i\kappa_y}{4[(\kappa_x - \tau)^2 + \kappa_y^2]} (4x^2 e^{-i2\alpha} - e^{i2\alpha}) \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{dy}{d\tau} = \frac{i\kappa_y}{4[(\kappa_x - \tau)^2 + \kappa_y^2]} (1 + 8xy) e^{-i2\alpha} \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{dz}{d\tau} = \frac{-i\kappa_y}{4[(\kappa_x - \tau)^2 + \kappa_y^2]} x e^{-i2\alpha}. \quad (\text{A.7})$$

Resolviendo numéricamente este sistema de ecuaciones diferenciales, podemos obtener el operador de evolución.

Explícitamente tenemos que

$$U(\tau) = \begin{pmatrix} (\cosh z + \sinh z)(1 + 4xy) & 2(\cosh z - \sinh z)x \\ 2(\cosh z + \sinh z)y & \cosh z - \sinh z \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

Anteriormente mencionamos que utilizaremos este método para comparar los resultados que obtenemos utilizando la expansión de Magnus, para ello escribimos la tasa de creación de pares en términos del operador de evolución anterior (A.8), Tomando en cuenta que inicialmente el sistema ocupa los estados de energía negativa, los cuales corresponden al estado,  $(0, 1)^T$ , tenemos que la tasa de creación de pares al tiempo  $\tau$  está dada por

$$|u(\tau)|^2 = 4|(\cosh z(\tau) - \sinh z(\tau))x(\tau)|^2. \quad (\text{A.9})$$

## Apéndice B

# Corrientes para campo eléctrico polarizado linealmente

En este apéndice evaluamos la corriente inducida en el grafeno por el efecto de una onda electromagnética polarizada linealmente que incide perpendicular al plano del grafeno. El resultado se expresa como una serie de potencias de  $\tilde{\lambda}$ , lo cual de acuerdo a la ec.(3.29) equivale a una expansión en potencias de la intensidad del campo eléctrico. El método seguido a continuación es similar al de la referencia [54], sin embargo el formalismo que se utilizó para llegar a las expresiones de la corriente es diferente, en nuestro caso está basado en el formalismo de Magnus-Floquet, mientras que en dicha referencia el método se basa en el uso de una transformación unitaria combinada con el uso de una función de prueba.

Tomando en cuenta las ecs.(3.26,3.24,3.27) tenemos que el promedio de la corriente de polarización toma la siguiente forma

$$J_x^{pol}(\xi) = -\frac{e v_F n_F}{\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^1 x \sin \theta \sin \left( \frac{\tilde{\lambda}}{x} \sin \theta \sin \xi \right) dx, \quad (\text{B.1})$$

para obtener este resultado se realizó el cambio de variable  $x = \kappa/\kappa_F$  en la integral de la ec.(3.27). El integrando de la ecuación anterior se expande en términos de polinomios de Bessel utilizando la siguiente identidad

$$\sin(z \sin \xi) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}(z) \sin [(2n+1)\xi], \quad z \equiv \frac{\tilde{\lambda}}{x} \sin \theta. \quad (\text{B.2})$$

Con lo cual la corriente en la ec.(B.1) toma la forma

$$J_x^{pol}(\xi) = -\frac{2ev_F n_F}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sin[(2n+1)\xi] G_n(\tilde{\lambda}), \quad (\text{B.3})$$

donde  $G_n(\tilde{\lambda})$  está dado por las siguientes expresiones

$$G_n(\tilde{\lambda}) = \int_0^{2\pi} d\theta \sin \theta F_n(\tilde{\lambda}, \theta), \quad F_n(\tilde{\lambda}, \theta) = \int_0^1 x J_{2n+1}\left(\frac{\tilde{\lambda}}{x} \sin \theta\right). \quad (\text{B.4})$$

La integral que determina la función  $F_n(\tilde{\lambda}, \theta)$  se puede evaluar de forma exacta con el siguiente resultado [113]

$$F_n(\tilde{\lambda}, \theta) = \frac{\tilde{\lambda}^2 \sin^2 \theta}{8n^3 + 12n^2 - 2n - 3} - \Gamma\left(n - \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} \tilde{\lambda} \sin \theta\right)^{2n+1} {}_1\tilde{F}_2\left(n - \frac{1}{2}; n + \frac{1}{2}, 2n + 2; -\frac{1}{4} \tilde{\lambda}^2 \sin^2 \theta\right). \quad (\text{B.5})$$

En la ecuación anterior  $\Gamma\left(n - \frac{1}{2}\right)$  es la función Gamma y  ${}_1\tilde{F}_2$  es la función hipergeométrica. La integral angular en la ec.(B.4) no se puede evaluar de forma exacta. Sin embargo,  $F_n(\tilde{\lambda}, \theta)$  se puede expresar como una expansión en serie de potencias de  $\tilde{\lambda}$ . Expandiendo la función  ${}_1\tilde{F}_2$  a orden  $\tilde{\lambda}^5$  obtenemos

$$F_n(\tilde{\lambda}, \theta) = \frac{\tilde{\lambda}^2 \sin^2 \theta}{8n^3 + 12n^2 - 2n - 3} + \tilde{\lambda}^{2n} \sin^{2n} \theta \left( \frac{2^{-2n-1} \sin(\theta) \tilde{\lambda}}{(1-2n)\Gamma(2n+2)} + \frac{2^{-2n-3} \sin^3(\theta) \tilde{\lambda}^3}{(2n+1)\Gamma(2n+3)} - \frac{2^{-2(n+3)} \sin^5(\theta) \tilde{\lambda}^5}{(2n+3)\Gamma(2n+4)} + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^6) \right). \quad (\text{B.6})$$

Sustituyendo este resultado en la primera ec.(B.4), nos permite evaluar la integral angular para cada término de la expansión. Al sustituir el resultado en la ec.(B.3) obtenemos finalmente el promedio de la contribución a la corriente de polarización como una serie en potencias de  $\tilde{\lambda}$ , a orden  $\tilde{\lambda}^5$  el resultado es el siguiente

$$J_x^{(pol)}(t) = -ev_F n_F \left\{ \tilde{\lambda} \sin(\omega t) \left( 1 + \frac{3}{32} \tilde{\lambda}^2 - \frac{5}{4608} \tilde{\lambda}^4 \right) - \frac{\tilde{\lambda}^3}{32} \sin(3\omega t) \left( 1 - \frac{5}{288} \tilde{\lambda}^2 \right) - \frac{\tilde{\lambda}^5}{9216} \sin(5\omega t) + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^7) \right\}. \quad (\text{B.7})$$

Para evaluar la corriente de conducción utilizamos las ecs. (3.26,3.24,3.27), con lo cual el promedio de la corriente sobre los momentos se expresa de la siguiente forma

$$J_x^{cond}(\xi) = -\frac{eV_F n_F}{\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \left( \cos \theta - \tilde{\lambda} \sin \xi \right) \int_0^1 \cos \left( \frac{\tilde{\lambda}}{x} \sin \theta \sin \xi \right) dx. \quad (\text{B.8})$$

En este caso el integrando se expande utilizando la siguiente expresión para la función generadora de polinomios de Bessel

$$\cos(z \sin \xi) = J_0(z) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(z) \cos(2n\xi), \quad z \equiv \frac{\tilde{\lambda}}{x} \sin \theta, \quad (\text{B.9})$$

que nos permite escribir la corriente de conducción como

$$J_x^{cond}(\xi) = \frac{eV_F n_F}{\pi} \tilde{\lambda} \sin \xi \sum_{n=0}^{\infty} \delta_n \cos(2n\xi) G'_n(\tilde{\lambda}), \quad \delta_n = \begin{cases} 1 & n = 0 \\ 2 & n > 0 \end{cases}, \quad (\text{B.10})$$

donde utilizamos el hecho de que la integral angular del término que incluye el  $\cos \theta$  se cancela. La función  $G'_n(\tilde{\lambda})$  está dado por las siguientes expresiones

$$G'_n(\tilde{\lambda}) = \delta_n \int_0^{2\pi} d\theta F'_n(\tilde{\lambda}, \theta), \quad F'_n(\tilde{\lambda}, \theta) = \int_0^1 J_{2n} \left( \frac{\tilde{\lambda}}{x} \sin \theta \right) dx. \quad (\text{B.11})$$

Utilizando la identidad  $\sin \xi \cos 2n\xi = \frac{1}{2} [\sin(2n+1)\xi - \sin(2n-1)\xi]$ , podemos reescribir la ec.(B.10) de la siguiente forma

$$J_x^{cond}(\xi) = \frac{eV_F n_F}{\pi} \tilde{\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \sin[(2n+1)\xi] K'_n(\tilde{\lambda}), \quad (\text{B.12})$$

donde

$$K'_n(\tilde{\lambda}) = \begin{cases} 2G'_0(\tilde{\lambda}) - G'_1(\tilde{\lambda}) & n = 0 \\ G'_n(\tilde{\lambda}) - G'_{n+1}(\tilde{\lambda}) & n > 0 \end{cases}. \quad (\text{B.13})$$

La integral que determina la función  $F'_n(\tilde{\lambda}, \theta)$  en la ec.(B.11) se evalúa de forma exacta obteniendo [113]

$$F'_n(\tilde{\lambda}, \theta) = \frac{\tilde{\lambda} \sin \theta}{4n^2 - 1} + \frac{(\tilde{\lambda} \sin \theta)^{2n} {}_1F_2 \left( n - \frac{1}{2}; n + \frac{1}{2}, 2n + 1; -\frac{1}{4} \tilde{\lambda}^2 \sin^2 \theta \right)}{4^n (1 - 2n) \Gamma(2n + 1)}. \quad (\text{B.14})$$

Para poder evaluar la integral angular en la primer ec.(B.11), expandimos la función  ${}_1\tilde{F}_2$  a orden  $\tilde{\lambda}^4$ , con lo cual obtenemos

$$F'_n(\tilde{\lambda}, \theta) \approx \frac{\tilde{\lambda} \sin \theta}{4n^2 - 1} + (\tilde{\lambda} \sin \theta)^{2n} \left( \frac{4^{-n}}{(1 - 2n)\Gamma(2n + 1)} + \frac{4^{-n-1} \sin^2(\theta) \tilde{\lambda}^2}{(2n + 1)^2 \Gamma(2n + 1)} - \frac{4^{-n-3} \sin^4(\theta) \tilde{\lambda}^4}{(n + 1)(2n + 1)(2n + 3)\Gamma(2n + 1)} + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^6) \right). \quad (\text{B.15})$$

Sustituyendo este resultado en la primera ec.(B.11) nos permite evaluar las integrales angulares y al sustituir en la ec.(B.12) obtenemos la corriente de conducción a orden  $\tilde{\lambda}^5$

$$J_x^{(cond)}(t) = ev_F n_F \left\{ \tilde{\lambda} \sin(\omega t) \left( 2 + \frac{3}{8} \tilde{\lambda}^2 - \frac{5}{768} \tilde{\lambda}^4 \right) - \frac{\tilde{\lambda}^3}{8} \sin(3\omega t) \left( 1 - \frac{5}{192} \tilde{\lambda}^2 \right) - \frac{\tilde{\lambda}^5}{1536} \sin(5\omega t) + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^7) \right\}. \quad (\text{B.16})$$

Observamos que las contribuciones de las corrientes de conducción y polarización son del mismo orden. Finalmente la corriente total  $J_x(t) = J_x^{(pol)}(t) + J_x^{(cond)}(t)$  se obtiene al sumar las contribuciones de la ec.(B.7) y la ec.(B.16)

$$J_x(t) = ev_F n_F \left\{ \tilde{\lambda} \sin(\omega t) \left( 1 + \frac{9}{32} \tilde{\lambda}^2 - \frac{25}{4608} \tilde{\lambda}^4 \right) - \frac{\tilde{\lambda}^3}{32} \sin(3\omega t) \left( 3 - \frac{25}{288} \tilde{\lambda}^2 \right) - \frac{\tilde{\lambda}^5}{9216} \sin(5\omega t) + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^7) \right\}. \quad (\text{B.17})$$

Es interesante señalar que sólo contribuyen potencias impares de la intensidad del campo eléctrico  $\lambda \propto E_0$ . Correspondiendo a cada potencia  $E_0^{(2n+1)}$ , la dependencia temporal es un armónico  $\sin[(2n + 1)\omega t]$ , cuya frecuencia es un múltiplo impar de la frecuencia de la radiación incidente.

# Bibliografía

- [1] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim *Rev. Mod. Phys.* **81** 109 (2009)
- [2] Novoselov, K.S., A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Gregorieva, & A.A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004)
- [3] A. O'Hare, F. V. Kusmartsev, & K. I. Kugel *Nano Lett.* **12** 1045 (2012)
- [4] L. Tapasztó, T. Dumitrica, S. J. Kim, P. Nemes-Incze, C. Hwang, & L. P. Biroli *Nature Phys.* **8** 739 (2012)
- [5] P. R. Wallace *Phys. Rev.* **71** 622 (1947)
- [6] G. W. Semenoff *Phys. Rev. Lett.* **53** 2449 (1984)
- [7] A. K. Geim & K. S. Novoselov *Nature Materials* **6** 183 (2007)
- [8] N. D. Mermin & H. Wagner *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133 (1966)
- [9] J. Meyer, A. K. Geim, M. Katsnelson, K. S. Novoselov, E. T. Booth, & S. Roth *Nature* **446** 60 (2007)
- [10] K.I. Bolotin, K.J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim & H.L. Stormer. <http://arxiv.org/abs/0802.2389>
- [11] J.H. Chen, C. Jang, S. Xiao, M. Ishigami & M. Fuhrer, *Nature Nanotech.* **3** 206 (2008)
- [12] A. H. C. Neto & K. S. Novoselov *Rep. Prog. Phys.* **74** 082501 (2011)
- [13] F. Schwierz, *Nature Technology* **5** 487 (2010)
- [14] F. V. Kusmartsev & A. M. Tsel'ik *JETP Lett.* **42** 257 (1985)

- [15] D. C. Elias *et al.* *Nature Physics* **7** 701 (2011)
- [16] X. Du, I. Skachko, A. Barker & E. Y. Andrei *Nature Nanotechnol.* **3** 491 (2008)
- [17] S. D. Sarma, S. Adam, E. H. Hwang & E. Rossi *Rev. Mod. Phys.* **83** 407 (2011)
- [18] J. S. Bunch *et al.* *Science* **315** 490 (2008)
- [19] S. Hu *et al.* *Nature* **516** 227 (2014)
- [20] R. Prasher *Science* **328** 185 (2010)
- [21] M. E. Pumarol *et al.* *Nano Lett.* **12** 2906 (2012)
- [22] R. R. Nair *et al.* *Science* **320** 1308 (2008)
- [23] F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan & A. C. Ferrari *Nature Photonics* **4** 611 (2010)
- [24] R. J. Stoehr, R. Kolesov, J. Pflaum, J. & J. Wrachtrup *Phys. Rev. B* **82** 121408 (2010)
- [25] J. Rafiee *Nature Mater.* **11** 217 (2012)
- [26] N. Savage *Nature* **483** S30-S31 (2012)
- [27] A. K. Geim & A. H. MacDonald *Physics Today* **60**(8) 35 (2007)
- [28] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov & A. K. Geim, *Nature Physics* **2** 620 (2006)
- [29] P. E. Allain & J-N Fuchs arXiv:1104.5632v1
- [30] M.I. Katsnelson and K. Novoselov *Europ. Phys. J. B* **51** 157 (2006)
- [31] B. Dóra & R. Moessner *Phys. Rev. B* **81** 165431 (2010)
- [32] J. Schwinger *Phys. Rev.* **82** 664 (1951)
- [33] Novoselov, K. S., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, & A. A. Firsov, *Nature* 438, 197 (2005)

- [34] Zhang, Y., Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [35] V. P. Gusynin & S. G. Sharapov *Phys. Rev. Lett.* **95** 146801 (2005)
- [36] Zhang et. al. *Phys. Rev. Lett.* **96** 136806 (2006)
- [37] A. F. Young & P. Kim *Nat. Phys.* **5** 222 (2009)
- [38] A. I. Nikishov *Sov. Phys. JETP* **30** 660 (1970)
- [39] T. D. Cohen & D. A. McGady *Phys. Rev. D* **78** 036008 (2008)
- [40] D. Allor, T. D. Cohen & D. A. McGady *Phys. Rev. D* **78** 096009 (2008)
- [41] B. Rosenstein, M. Lewkowicz, H. C. Kao, Y. Korniyenko *Phys. Rev. B* **81** 041416(R) (2010)
- [42] S.N. Shevchenko, S. Ashhab, Franco Nori *Physics Reports* 492 (2010) 1-30
- [43] Noato Tanji *Annals of Physics* **324** 1691 (2009)
- [44] Magnus W. *Commun. Pure Applied Math.* **VII** 649673 (1954)
- [45] S. Blanes et. al. *Physics Reports* 470 (2009) 151–238
- [46] J. C. D’Olivo *Phys. Rev. D* **45** 924 (1992)
- [47] B. Mielnik & J. Plevanski *Ann. Inst. H. Poincaré Sec. A* **12** 215 (1970)
- [48] M. Grifoni & P. Hänggi *Physics Reports* **304** 229 (1998)
- [49] S. I. Chu & D. A. Telnov *Physics Reports* **390** 1 (2004)
- [50] A. López, A. Z. Z. Sun and J. Schliemann *Phys. Rev. B* **85** 205428 (2012)
- [51] M. Abramowitz & I. Stegun *Handbook of Mathematical Functions* Dover 1972
- [52] D. Mendoza *World Journal of Nano Science and Engineering* 2012, 2, 53-57

- [53] S. A. Mikhailov *Europhysics Letters* **79** 27002 (2007)
- [54] F. J. López-Rodríguez & G. G. Naumis *Phys. Rev. B* **78** 201406 (2008)
- [55] F. J. López-Rodríguez & G. G. Naumis *Philosophical Magazine* **90** 2977 (2010)
- [56] B.M. Fregoso, Y.H. Yang, N. Gedik & V. Galitski *Phys. Rev. B* **88** 155129 (2013)
- [57] T. Oka y H. Aoki *Phys. Rev. B* **79**, 081406(R) (2009)
- [58] V. Syzranov, M. V. Fistul, y K. B. Efetov *Phys. Rev. B* **78**, 045407 (2008)
- [59] B.Fainberg *Phys. Rev. B* **88** 245435 (2013)
- [60] C. L. Kane & E. J. Mele *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801 (2005)
- [61] N. H. Lindner, G. Refael & V. Galtski *Nat. Phys.* **7** 490 (2011)
- [62] T. Kitagawa, T. Oka, A. Brataas, L. Fu & E. Demler *Phys. Rev. B* **84** 235108 (2011)
- [63] G. Plateros & R. Aguado *Phys. Rep.* **395** 1 (2004)
- [64] T. Dittrich, P. Hanggi, G. L Ingold, B. Kramer, G. Schon & W. Zwerger *Quantum Transport and Dissipation: Cap. 5* Wiley-VCH (1998)
- [65] M.I. Katsnelson *Graphene: Carbon in two dimensions* Cambridge University Press (2013)
- [66] T. Stauber, N. M. R. Peres & A. K. Geim, *Phys. Rev. B* **78** 085432 (2008)
- [67] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov & J. P. Carbotte *Phys. Rev. B* **75** 165407 (2006)
- [68] L. A. Falkovsky & A.A. Varlamov *Europ. Phys. J. B* **56** 281 (2007)
- [69] H. Wang, D. Nezich, J. Kong & T. Palacios *IEEE Electron Device Lett.* **30** 547 (2009)

- [70] I.I. Rabi *Phys. Rev.* **51** 652 (1937)
- [71] B. W. Shore & P. L. Knight *J. of Modern Optics* **40** 1195-1238 (1993)
- [72] Quantum Optics. Marlan O. Scully y Suhail Zubairy. Cambridge University Press 2001.
- [73] O. V. Kibis *Phys. Rev. B* **81**, 165433 (2010)
- [74] S. L. Abergel and T. Chakraborty *Appl. Phys. Lett.* **95**, 062107 (2009)
- [75] R. W. Robinett *Phys. Rep.* **1**, 392 (2004)
- [76] J.A. Yeazell, M. Mallalieu, & C.R. Stroud Jr. *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2007 (1990)
- [77] D.R. Meacher, P.E. Meyler, I.G. Hughes, & P. Ewart *J. Phys. B* **24**, L63 (1991)
- [78] A. ten Wolde, L.D. Noordam, A. Lagendijk, H.B. van Linden van den Heuvell *Phys. Rev. A* **40**, 485 (1989)
- [79] M.L. Naudeau, C.I. Sukenik, P.H. Bucksbaum, *Phys. Rev. A* **56**, 636 (1997)
- [80] M. Dantus, R.M. Bowman, A.H. Zewail *Nature* **343**, 737 (1990)
- [81] P.T. Greenland *Contemp. Phys.* **31**, 405 (1990)
- [82] E.M. Wright, T. Wong, M.J. Collett, S.M. Tan, D.F. Walls *Phys. Rev. A* **56**, 591 (1997)
- [83] A. Imamoglu, M. Lewenstein, L. You *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2511 (1997)
- [84] F. Sols *Physica B* **194**, 1389 (1994)
- [85] B. Dóra, K. Ziegler, P. Thalmeier, y M. Nakamura *Phys. Rev. Lett.* **102**, 036803 (2009)
- [86] V. Krueckl & T. Kramer *New. Journal. Phys.* **11**, 093010 (2009)
- [87] E. Romera y F. de los Santos *Phys. Rev. B* **80**, 165416 (2009)
- [88] M. Fleischhauer & W. P. Schleich *Phys. Rev. A* **47** 4528 (1993)

- [89] H.L. Calvo, H.M. Pastawski, S. Roche & L.E.F.F. Torres *App. Phys. Lett.* **98** 232103 (2011)
- [90] M. Yang, W.L. Zhang, R.Q. Wang & Y.K. Bai *arXiv:1601.01269v* (2016)
- [91] Vadim V. Cheianov & Vladimir I. Fal'ko *Phys Rev B* **74** 041403 (2006)
- [92] A. De Martino, L. Dell'Anna & R. Egger *Phys. Rev. Lett.* **98** 066802 (2007)
- [93] L. Oroszlany, P. Rakyta, A. Kormanyos, C. J. Lambert & J. Csert *Phys Rev B* **77** 081403 (2008)
- [94] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, A. Matulis & F. M. Peeters *Phys. Rev. B* **77** 235443 (2008)
- [95] L. Dell'Anna and A. De Martino *Phys. Rev. B* **79** 045420 (2009)
- [96] L. Dell'Anna and A. De Martino *arXiv:1101.1918v1* (2011)
- [97] S. Ghosh & M. Sharma *J. Phys.: Condens. Matter* **21** 292204 (2009)
- [98] E. Milpas, M. Torres & G. Murguia *J. Phys.: Condens. Matter* **23** 245304 (2011)
- [99] S. J. Lee, S. Souma, G. Ihm & K. J. Chang *Phys. Rep.* **394** 1 (2004)
- [100] T. Vancura, T. Ihn, S. Broderick, K. Ensslin, W. Wegscheider & M. Bichler *Phys. Rev. B* **62** 5074 (2000)
- [101] H. A. Carmona, A. K. Geim, A. Nogaret, P. C. Main, T. J. Foster & M. Henini *Phys. Rev. Lett.* **74** 3009 (1995)
- [102] P. D. Ye, D. Weiss, R. R. Gerhardts, M. Seeger, K. Von Klitzing, K. Eberl & H. Nickel *Phys. Rev. Lett.* **67** 3013 (1995)
- [103] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Dubonos, Y. G. Cornelissens, F. M. Peeters & P. Vasilopoulos *Phys. Rev. B* **65** 233312 (2002)
- [104] F. M. Peeters & A. Matulis *Phys. Rev. B* **48** 15166 (1993)

- [105] A. Matulis, F. M. Peeters & P. Vasilopoulos *Phys. Rev. Lett.* **72** 1518 (1994)
- [106] K. Handrich, *Phys. Rev. B* **72**, 161308 (2005)
- [107] B. Midya & D. J. Fernández *J. Phys A* **47** 285302 (2014)
- [108] M. O. Goerbig, *Quantum Hall Effects*. Oxford University Press
- [109] L. D. Landau & L. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, non-relativistic. Pergamon Press
- [110] F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme *Supersymmetry in Quantum Mechanics*. World Scientific
- [111] J. A. Récamier *Chem. Phys. Lett.* **408** (2005) 205-209
- [112] J. Wei and E. Norman *Proc. Am. Math. Soc.* **15** 327 (1964)
- [113] I.S. Gradshteyn & I.M. Ryzhik *Table of Integrals, Series, and Products* 7a Edición Academic Press (2007)